ファインマン／ヒッブス

量子力学と経路積分

北原和夫訳

みすず書房

QUANTUM MECHANICS AND PATH INTEGRALS

By

R. P. Feynman

and

A. R. Hibbs

序　　文

量子力学に対する経路積分法の基礎となる物理学と数学の諸概念は，当時プリンストン大学の大学院生であった R.P. Feynman によってはじめて展開された．この本では，さらに発展された考え方を述べるが，それらが実際に完成されたのは数年後のことである．その当時の研究の多くは，電子の自己エネルギーの発散に関するものであった．この問題の研究の中で，半分の先行ポテンシャルと半分の遅延ポテンシャルを用いた「最小作用」の原理が発見された．この原理によって，古典電気力学を応用するときに現れる発散をうまく扱うことができたのである．

よって，この作用原理を量子力学に応用して，$h \to 0$ のときに量子力学の特殊な場合として古典力学が自然に導かれるようにすることが問題となった．

Feynman は，量子力学的な振る舞いを古典力学の概念(たとえば，ラグランジアン，特に Hamilton の原理の関数 S と呼ばれるラグランジアンの不定積分）に結び付けるような研究が過去になされていなかったかどうかを調べていた．ヨーロッパから訪れてきていた1人の物理学者との会話の中で，Feynman は Dirac が書いたある論文のことを知った．その論文の中で Dirac は，ラグランジアンに $i\epsilon$ を掛けたものの指数関数が量子力学的波動関数に対する変換関数と類似していることを示唆していた．すなわち，ある時刻における波動関数にこの指数関数を掛けると，次の時刻（時間 ε だけ後）における波動関数が得られるのである．

そこで問題となったのは，Dirac が「類似している」と言ったことの意味である．Feynman は，「類似している」という言い方を「等しい」という表現に置き換えることができるかどうかを明らかにしようと決心したのである．簡単な解析をした結果，実際にこの指数関数をそのまま使えることがわかったのである．

さらに解析してみると，有限の時間に対する変換関数として，ラグランジアンの時間積分 S（本書では作用と呼ぶ）の指数関数を使えばよいことがわかったのである．しかし，この関数を適用する際に，すべての時刻においてすべての空間変数についての積分を実行することが必要である．

この考え方を述べるための論文*)を準備している間に，空間座標についての積分を記述しかつ評価する１つの方法として「すべての経路についての積分」という考え方を発展させた．この頃までに，経路積分の方法を応用するための数学的道具立てが数多く展開されており，多くの特殊な例について具体的に研究が行われていた．しかしながら，この当時の研究の主要な部分は量子電気力学に向けられていた．実際，経路積分は量子電気力学の発散の困難を避けるための方法を真に満足できる形では与えていなかったし，今でも与えているわけではない．しかし，この分野の他の問題を解くのにはもっとも有用であることがわかってきた．特に，この方法によると，相対論的不変性が明らかになる形で量子電気力学の法則が表されるのである．さらに，量子力学の他の問題に対しても有用な応用が見出されてきた．

取り扱いの困難な量子力学的問題に対して，経路積分法がもっとも劇的に応用されたのは，Lamb 偏移が発見されてこの偏移を説明する際の理論的困難が生じた直後のことであった．その困難とは，積分発散を避けるために導入される明らかに人為的な方法を用いることなくこの偏移を説明しなければならないということであった．経路積分の方法によって，これらの厄介な発散を理論的にかつ矛盾のない形で扱うことができたのである．

カリフォルニア工科大学では，数年にわたり量子力学を教えるための手法として，経路積分の方法を用いた．この期間中に，Feynman の学生の A.R. Hibbs が１組のノートを作り始め，量子力学に対する経路積分の方法についての講義を同じ題の本としてまとめやすくした．

その後の数年間，その本が編纂されている間に，他のテーマも Feynman 博士の講義やその本の中にも取り入れられることになった．その例が統計力学と変分法である．同時に，量子力学を教える際の Feynman の方法は，初期の経路積分の方法からややはずれる形で発展した．今日では，量子力学のもっと一般的な問題を解くのに，演算子の手法が深くまた有効であるように見える．しかし，経路積分の方法は量子力学的振る舞いに対する直感的描像を与えるものであり，これは量子力学法則の直感的把握のために大変に重要である．それゆえに，量子力学の中で経路積分の方法が特に有効となる分野（本書で，その大部分について述べてある）において，物理

*) R.P. Feynman; Space-Time Approach to Non-relativistic Quantum Mechanics, *Rev. Mod. Phys.* **20**, 367 (1948).

学の研究者は量子力学の基本原理をよく把握することができ，それによって，理論物理学の広い分野の問題の解決に力を発揮できることになる．

R.P. Feynman
A.R. Hibbs

量子力学と経路積分

目　　次

第1章　量子力学の基本概念

1-1　量子力学における確率*)

20世紀の初め頃から，実験物理学の分野で，古典力学の妥当性を否定するような奇妙な現象が印象的なほどに続々と蓄積されていた．これらの新しい現象を説明できるような理論の枠組を発見しようとさまざまな試みがなされた結果，光や電子は波動のように振る舞ったり粒子のように振る舞ったりするように見える，という錯綜した事態がまず生じたのである．この一見矛盾に満ちた事態は，1926年と1927年に量子力学と呼ばれる理論によって完全に解決された．この新しい理論によれば，精密な結果を予測することが根本的に不可能であるような実験が存在するのであり，その場合，いろいろな結果の確率を計算することで満足しなければならないということになる．さらにもっと根本的なことは，自然の法則の中にある確率は，Laplaceの古典確率論における確率法則と異なるものであるという発見であった．物理的世界における量子力学の法則は，実験の対象の大きさが増大すればするほど，Laplaceの法則に近くなる．したがって，伝統的に使われている確率法則は，ルーレットの盤の動きを解析するのに役立つのであるが，1個の電子や1個の光子の振る舞いを解析するのには役に立たない．

1つの概念上の実験　確率という概念自体は量子力学においても変わらない．実験のある結果の確率が p であるというとき，これは通常の意味で確率が p である，といっているのである．すなわち，実験が何回もくりかえされれば，その特定の結果を与える実験の数の割合はおおむね p となる．ここで，これ以上，確率の概念を詳細に分析したり定義したりしないことにする．というのは，古典統計学で使用され

---

*)　この章の内容の大部分は R. P. Feynman の講義録であり,「量子力学における確率の概念」という題で *Second Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability* (University of California Press, Berkeley, Calif., 1951) に収録されている．

ている確率概念から外れる必要がないからである．

根底から変更されたのは，確率を計算する方法である．原子の大きさ程度のものを対象とするとき，この変更の影響は非常に大きい．それゆえに，1個の電子についての思考実験で予想される結果を例として，量子力学の法則を示すことにしよう．

想像上の実験は図1-1で示されている．A には電子線源 S がある．S にある電子は全部同じエネルギーで全方向に放射され，スクリーン B に入射する．スクリーン B には穴が2つ開いており(1と2)，電子はそれらを通り抜けることができる．スクリーン B の背後の平面 C には電子検出器があり，スクリーンの中心からの距離 x を変えることができるものとする．

検出器が非常に感度のよいものであれば(Geiger 計測管のように)，x に到達する電子流は連続的でなく，粒子が断続的に観測される．電子線源 S の強度が非常に小さければ，個々の粒子が時間間隔をおいて到達するのが検出器によって記録される．それゆえに，電子は粒子であるというのである．電子線源 S が非常に弱いとき，スクリーン全体に同時に多くの検出器を置いたとしよう．このときは，検出器のうちの1つだけが電子に感応し，しばらくすると，他の検出器が電子の到達を記録するということになるであろう．検出器が半分だけ感応するということはありえず，電子が1個到達するか，あるいは，何も起こらないかのどちらかであるはずである．2つの検出器が同時に感応することは決して起こらない（ただし，検出器の時間分

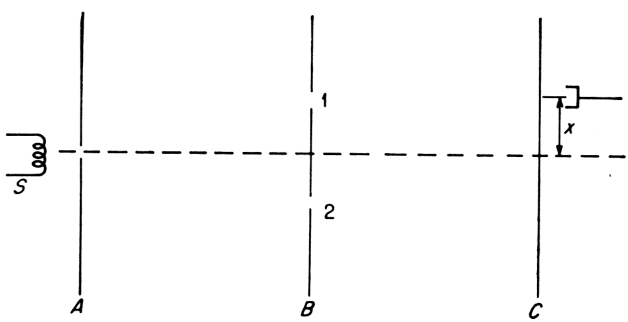


図1-1　実験の設定．A において放出された電子はスクリーン C における検出器に到る．その間に，2つ穴が開いているスクリーン B を置く．検出器は到達する電子を1つ1つ計測する．スクリーン C の中心から x の距離のところに検出器を置いたときに，そこに到達する電子の数が測定される．その数の割合を，図1-2に示すように，x の関数としてグラフにする．

解の精度内に電子線源から2個の電子が放射されるという同時計測の場合は除くことにする．電子線源が弱ければ弱いほど，同時計測の確率は小さくなる）．つまり，図1-1の検出器は，1個の粒子的実在が S から出てスクリーン B の穴を通って点 x に到る飛程を記録することになる．

この特殊な実験が上に述べたような具合に実際に行われたことはなかった．これまで実際に行われたこのタイプの実験をすべてうまく説明する法則に従ってみたときに，上の思考実験の結果がいかなるものとなるのかを，以下に述べよう．われわれの結論を直接示すような実験もいくつか行われたが，そのような実験は通常もっと込み入ったものである．ここでは，教育的配慮から，原理的にもっとも単純な実験を選ぶことにして，実際にそれを実験するときのいろいろな難点については触れないことにする．

ついでにいうと，この実験では，電子の代わりに光を用いても，同じ問題の本質が示される．線源 S は単色光の光源であり，検出器は光電池や，さらによいものとしては，光子増倍管であるとする．それらは，1個の光子が到達したことをパルスとして記録するものである．

検出器の位置 x に対して，われわれが観測するのは毎秒当たりのパルスの平均数である．すなわち，実験的に，電子が放射源 S から出て x に到る（相対）確率を x の関数として決めるのである．

この確率を x の関数としてグラフにすると，図1-2a に定性的に示されているように，複雑な曲線となる．この曲線はいくつかの極大と極小をもち，スクリーンの中心の近くでも電子がほとんど到達しない所がある．この曲線の構造を決めている法則を発見することが物理学の問題なのである．

電子が粒子のように振る舞うということから，まず次のように考えてみよう：

I．線源 S から x に進む電子はそれぞれ，穴1か穴2のどちらか一方を通る．

　Iの帰結として，次のIIが予想される．

II．x に到達する確率は，穴1を通って到達する確率 P_1 と穴2を通って到達する確率 P_2 との和である．

直接実験することによってこのことが正しいかどうか確かめることができる．それぞれの確率は容易に決められる．穴2を閉じて，穴1だけを開いたときに x に到達する確率を測定すればよいだけである．これによって，1を通ってくる電子が x に到達する確率 P_1 が与えられる．その結果は図1-2b に与えられている．同様にし

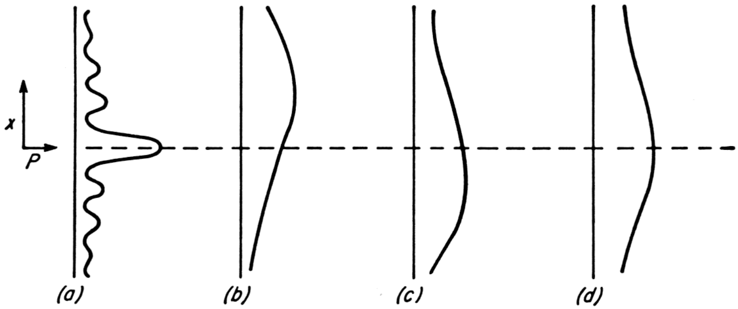


図1-2 実験結果．電子が x に到達する確率を検出器の位置 x の関数として表す．図1-1の実験の結果は（a）である．穴 1 だけが開いている場合，結果は（b）である．穴 2 だけが開いている場合，結果は（c）である．個々の電子はどちらかの穴だけを通るものとすると，両方の穴が開いている場合，曲線（d）=（b）+（c）が予想される．これは，実際に得られる曲線（a）とかなり異なる．

て，1 を閉じることにより，穴 2 を通って到達する確率 P_2 が得られる（図1-2c）．

これら確率の和（図1-2d）は曲線（a）と一致しない．したがって，実験によると確かに $P \neq P_1 + P_2$ なのであり，IIの推論は誤りであることになる．

確率振幅 両方の穴が開いているときに x に到達する確率は，穴 1 だけが開いているときの確率と穴 2 が開いているときの確率との和では**ない**．実際，複雑な曲線 $P(x)$ はよく知られた曲線である．S を出発した波が 2 つの穴を通ってスクリーン C に到達したときに生じる干渉パターンの強度分布そのものである（図1-3）．波動を表現するもっとも簡単な方法は複素数を使うことである．したがって，数学的に $P(x)$ の意味を正確に表現すれば，次のようになる．$P(x)$ は，x に到達することを表すある複素数 $\phi(x)$［これを**確率振幅**と呼ぶ］の絶対値の 2 乗である．電子スピンも考慮するときは，$\phi(x)$ は複素数値のベクトルとなる．さらに，$\phi(x)$ は 2 つの部分の和として表される．すなわち，穴 1 を通って到達する確率振幅 ϕ_1 と穴 2 を通って到達する確率振幅 ϕ_2 との和となる．よって，次の法則が成り立つ．

III．複素数 ϕ_1 と ϕ_2 があって，以下の式が成り立つ．

$$P = |\phi|^2 \tag{1-1}$$

$$\phi = \phi_1 + \phi_2 \tag{1-2}$$

$$P_1 = |\phi_1|^2, \quad P_2 = |\phi_2|^2 \tag{1-3}$$

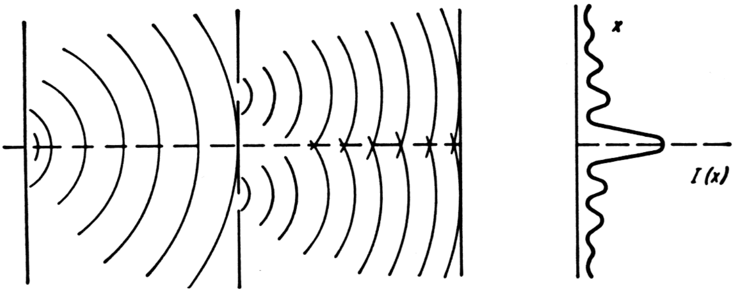


図1-3　波の干渉についての類似の実験．図1-2a の複雑な曲線 $P(x)$ は，S から出発して2つの穴を通って x に到る波の強度 $I(x)$ と同じである．穴1からの素原波と穴2からの素原波はある点 x において相殺的に干渉する（すなわち，穴2からの波の谷が到達すると同時に穴1からの波の山が到達する）．他の点では相加的干渉が起こる．この干渉により曲線 $I(x)$ の極大・極小が複雑に現れる．

後の章で，ϕ_1 と ϕ_2 の実際の計算について詳しく論じる．ここでいえることは，たとえば ϕ_1 は，ある波動方程式の解であり，放射源 S から穴1へそして穴1から x へと伝播する波を表現するものである，ということである．すなわち，ϕ_1 は電子（光の場合は光子）の波動性を表している．

まとめ：われわれは，x にある検出装置に到達する波の強度（振幅の絶対値の2乗）を**計算**し，その強度を，粒子が x に到達する確率として**解釈**する．

論理的困難　注目すべきことは，このように波動性と粒子性とを両方用いることが何ら矛盾を生じないということである．ただし，その際に，実験の状況についてどのような言明が許されるかに細心の注意を払う必要がある．

この点についてもっと詳しく論じるために，まず，確率の合成に関する上述の新しい法則IIIによれば，一般に $P=P_1+P_2$ が成り立たないということになるが，このことから生じる状況を考えてみることにしよう．2つの穴が開いているとき，粒子がどちらか一方の穴を通るということは正しくないという結論にせざるを得ない．なぜなら，もし粒子がどちらか一方の穴を通るというのであるならば，x に到達する仕方をすべて，穴1を通るか，穴2を通るかのどちらかに分類することができることになる．よって，x に到達する頻度 P は，穴1を通って到達する頻度 P_1 と穴2を通って到達する頻度 P_2 との和になるべきなのである．

上記のような驚くべき結論によって生じる論理的困難をのり越えるために，いろ

いろな工夫をしてみることもできる．たとえば，電子は穴１を通ったあと穴２を通って戻り，複雑な軌道を通ったあとで最終的に穴１を通り抜けて出てくるのだ，と考えることもできる．あるいはまた，電子は何らかの形で拡がって分かれて両方の穴を通ってIIIのような干渉効果を生じるのだ，と考えることもできよう．あるいはまた，穴２を閉じることが穴１の近くでの電子の運動に影響を及ぼすかも知れないので電子が穴１を通る確率 P_1 は正しく決定できないのだ，と考えることもできる．このような古典的描像に基づく機構が，実験結果を説明するために，数多く試みられてきた．光子を用いる場合（この場合もIIIの法則が成り立つ），２つの経路（１と２）の間隔を数 cm 程度にしても干渉パターンを生じるが，これだけの間隔があれば２つの軌道は独立と考えてよい．実際の状況が想像以上に深遠であることは，次のような実験によって明らかとなる．

観測の効果　$P \neq P_1 + P_2$ であることから論理的に考えると，電子が穴１か穴２のどちらかを通るのだとする単純な仮定に基づいて電子の運動の解析をすることができるとするのは正しくないということになる．このことを直接確かめる実験を考案するのはやさしい．穴の後方に光源を置いて，電子がどの穴を通ったかを見ていればよいのである（図1-4）．電子は光を散乱するから，光が穴１の後方で散乱されたならば，電子が穴１を通ったのだと結論してよい．もし，光が穴２の近くで散乱されたら，電子が穴２を通ったのだと結論できる．

この実験の結果は，電子が穴１か穴２のどちらか一方を通過したということをはっきりと示すはずである．すなわち，スクリーン C に到達する電子は，穴１の後方か穴２の後方かのどちらかで光を散乱するのであり（光は十分強く観測可能であるとする），決して両方で光を散乱することはない（ただし，線源 S は非常に弱いものとする）．（もっと精密な実験をすれば，電荷が穴を通る場合にどちらか一方の穴を通るのであり，また電荷は１個の電子の電荷がそのまま通るのであって，半端に割れて通るのでない，ということを示すことができるはずである．）

ここで１つの逆説が生じることになる．２つの実験を組みあわせてみよう．すなわち，電子がどちらの穴を通るかを観測し，同時に，電子が x に到達する確率を測定するのである．こうすれば，x に到達する電子が穴１か穴２かのどちらを通ってきたのかを，実験的に検証することが可能となる．まず，P_1 が曲線 (b) （図1-2）で与えられることが確かめられる．なぜなら，x に到達する電子のうちで穴１を通ったと

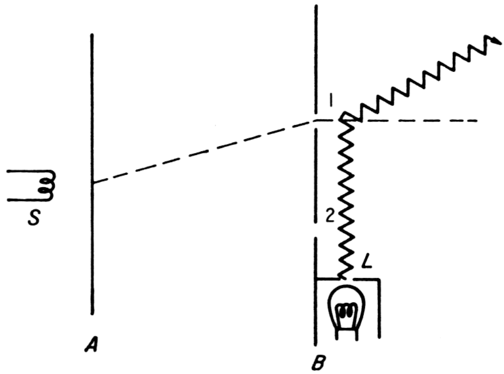


図1-4　図1-1の実験を修正したもの．ここではスクリーン B の背後に光源 L を置き，穴1あるいは穴2を通り抜ける電子によって散乱される光を調べる．強い光源を用いると，それぞれの電子がどちらの穴を通りぬけているかがわかる．ところがこの場合，x に到達する確率は図1-2a で与えられるようなものではなく，むしろ図1-2d で与えられるようなものである．

思われる（そこで光を散乱させることによって確かめられる）電子のみを選べば，たしかに曲線（b）のような分布になっていることがわかるからである（この結果は穴2が開いているか閉じているかによらず得られるものである．したがって，穴2を閉じることは穴1の近くの運動に対して何らの影響も与えないということが確かめられた）．穴2において光を散乱する粒子を選べば，図1-2c に示したような P_2 が得られる．このようにしてそれぞれの電子は穴1か穴2のいずれかに現れることになったのであるから，電子を2つの類に分けることが可能である．それらを一緒にすれば，図1-2d で示したような $P=P_1+P_2$ が得られるはずである．実際，実験すればそうなる．この場合，分布は曲線（a）の干渉効果IIIを示さないのである．

どこが違うのであろうか．電子がどの穴を通るかを観測する場合に $P=P_1+P_2$ という結果が得られる．そのことを観測しない場合に，違った結果

$$P=|\phi_1+\phi_2|^2\neq P_1+P_2$$

が得られる．

電子を観測するというだけで，電子が x に到達する確率を変えてしまったのである．どうしてこういうことが起こるのだろうか．その答えは次のようである．すなわち，観測するために光を用いたのであるが，光は電子と衝突するときに電子の運動を変えてしまうと考えられる．もっと厳密な言い方をすれば，電子が x に到達す

る確率を変えてしまうと考えられる．

それならば，もっと弱い光を使ってその効果をもっと弱くすることはできないのだろうか．無視できるほどの弱い擾乱ならば，たしかに分布が（a）から（d）へと有限の変化をすることはないと考えられる．しかし，弱い光が弱い擾乱を意味するわけではない．光はエネルギー $h\nu$（ν は振動数），運動量 h/λ（λ は波長）の光子として入射してくる．光を弱くするということは光子の数を少なくするということであって，電子を見出す確率が減るというだけである．しかし，電子を見出したときには，完全に1個光子が散乱されたことになるのであり，h/λ の程度の有限な運動量が電子に与えられることになる．

見出せなかった電子は干渉の法則（a）によって分布しており，見出せた電子すなわち光子を散乱した電子は（d）の確率 $P=P_1+P_2$ で x に到達する．したがってこの場合全体の分布は（a）と（d）の加重平均となる．強い光の場合，ほとんどすべての電子が散乱されるので，分布は（d）に近くなる．非常に弱い光の場合，ほんの少ししか散乱されないので（a）のようになる．

光がもつ運動量は h/λ であるのだから波長 λ の長い光を使えば弱い効果が得られると考えることもできる．しかしこれには限界がある．あまり長い波長の光を使うと穴1のところで散乱されたのか穴2のところで散乱されたのかを区別することができなくなる．というのは，波長 λ の光源の位置を λ の程度よりも精密に確定することができないからである．

このように，パラドックスがないものとすれば，電子が通過する穴がどちらであるかを決める物理実験を行うと，必ず分布を（a）から（d）に変えてしまう擾乱が引き起こされるということになる．

このことに初めて気づいたのは Heisenberg であり，彼は不確定性原理の中で，新しい力学が無矛盾であるためには実験の精度に限界がなければならないと述べている．この原理によれば，電子が通過する穴を決定でき，かつ，電子をほとんど偏向させずその干渉パターンをくずさずにすむような精密な装置を考案することはまったく不可能であるということになる．量子力学が無矛盾であるためには，この不確定性が，電子の通過する穴を決定するためのあらゆる物理的手段に関して成り立つ一般的なことであることは明らかである．この世界が半分量子力学的で半分古典力学的である，ということはありえない．不確定性原理に対する例外はまだ発見されていない．

1-2　不確定性原理

不確定性原理を次のように表現する．2つ以上の選択肢の可能性をもつ過程がそのうちの1つの選択肢を決定すると，それぞれの選択肢の間の干渉が消える．しかし，Heisenberg 自身による不確定性原理の表現は，ここでわれわれが述べたような形ではなかった．ここでしばらくわれわれの議論を措いて Heisenberg の本来の表現について述べることにしよう．

古典物理学では，粒子はある特定の軌道に沿って運動するものとして記述され，また，任意の時刻においてたとえば位置と速度とが正確に与えられるものとして記述される．そのような描像では，前に見たような量子力学独特の変な結論はでてこない．Heisenberg の不確定性原理はそのような古典的な考え方の精度に限界を与えるのである．たとえば，粒子が特定の位置と特定の運動量をもつという考え方には限界がある．現実の系（すなわち，量子力学に従う系）は，古典的見地から見ると，位置と運動量が特定できないで不確定な系として見える．位置の不確定性は注意深い測定によって減らすことができるし，他の測定手段によって運動量を特定することもできる．しかし，Heisenberg がその原理の中で述べているように，両者を同時に正確に知ることはできないのである．どのような実験においても，運動量と位置の不確定性の積は $\hbar$† の程度よりも小さくなることはない．このことはこれまで議論してきた状況において物理的無矛盾性のために要請されるものであり，電子の通る穴を決めるための次のような方法を考察することによっても示される．

例　電子が一方の穴を通って曲がると運動量の垂直成分が変化する．さらに，穴1を通って検出器 x に到達する電子は穴2を通ってくる電子と較べて軌道の曲がりかたも異なり，したがって運動量の変化分も異なる．B におけるスクリーンが固定されていなくて，上下に自由に動けるものとする（図1-5）．電子が一方の穴を通る際に運動量の垂直成分が変化すると，スクリーンの運動量も変化しその変化分は電子の運動量の変化分の符号を逆にしたものとなるようにする．この運動量の変化は，電子が通過する前と後でのスクリーンの速度を測定することによって検出できる．電子が穴1を通るときと穴2を通るときの運動量変化の差を δp とする．特定の電子がどちらの穴を通ったかを厳密に決めるためには，スクリーンの運動量を δp よ

† $\hbar = h/2\pi = 1.054 \times 10^{-27}$ erg s，h は Planck 定数

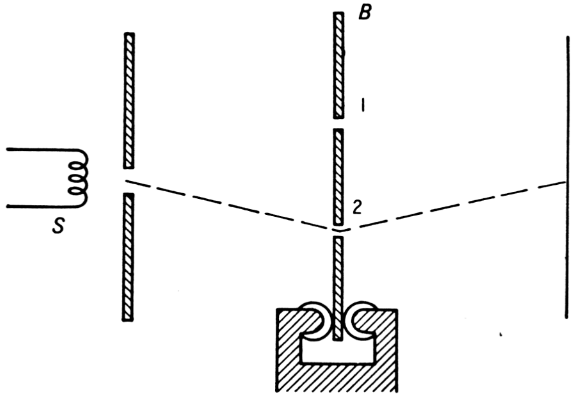


図1-5 図1-1の実験を変更したもう1つの例, スクリーン B は固定せず上下に動けるようにする. 電子が穴2を通って検出器 (例えば, $x=0$ に置かれている) に到達すると, 電子は上向きに方向を変えスクリーン B は下向きに反跳される. 電子が穴を通過するたびに, 電子がどちらの穴を通ったかを決めるには, スクリーンを初めに静止させておいてその後に上下いずれかの方向に反跳されたかを測定すればよい. しかし, Heisenberg の不確定性原理によると, スクリーン B の運動量測定をそのように精密に行うことは, スクリーンの上下方向の位置を精密に知ることと矛盾するのである. よって, 2つの穴の中点が正しい位置におかれているかどうか確かではあり得ない. 図1-2a の $P(x)$ の代わりに, 確率は上下方向にボケるので図1-2d と似た形になる.

りもよい精度で決定することが必要となる.

スクリーン B の運動量を必要な精度で測定できる実験装置がつくれたとしよう. その場合, 電子が通過した穴が特定できるわけだから, 電子の分布は図1-2の曲線 (d) のようになるはずである. 曲線 (a) のような干渉パターンは生じないはずである. どうしてこういうことになるのだろうか. これを理解するために次のことに注目しよう. 面 C 上の分布曲線を構成するためには, スクリーン B 上の2つの穴の垂直方向の位置を正確に知ることが必要である. したがって, スクリーン B の運動量だけでなく位置も測定しなければならない. 曲線 (a) の干渉パターンが現れるためには, B の垂直方向の位置は, $d/2$ よりもよい精度で知られている必要がある [d は曲線 (a) の極大点の間の間隔]. B の垂直方向の位置が, この精度で知られていないものとしよう. その場合, 図1-2a のすべての点の垂直方向の位置は $d/2$ よりもよい精度で特定できないことになる. なぜなら, 垂直方向の位置を測定する物差しの零点を B 上のある名目上の零点と重ねておかなければならないからである. よって,

ある高さ x での P の値は x の上下 $d/2$ の間での平均値として求められる．明らかに，干渉パターンはこの平均操作でならされてしまう．結局，図1-2dのような曲線が得られるのである．

初めに述べた実験における干渉パターンは電子が波のように振る舞うことの表現であった．このパターンは，どんな波動についても同様であるから，光回折の理論でよく知られている結果を用いることができる．すなわち，2つの穴の間隔を a，スクリーン B と面 C との間隔を l，光の波長を λ とすると，図1-6に示したように

$$\frac{a}{l}=\frac{\lambda}{d} \tag{1-4}$$

という関係がある．第3章で示すように，電子の波長は電子の運動量と密接に関係していて，

$$p=h/\lambda \tag{1-5}$$

が成り立つ．p を電子の運動量とすれば（すべての電子が同じ運動量をもっているとして），図1-7に示すように，$l \gg a$ のときに，

$$\frac{\delta p}{p}\simeq\frac{a}{l} \tag{1-6}$$

が成り立つ．これより

$$d\simeq\frac{h}{\delta p} \tag{1-7}$$

が得られる．実験的には干渉パターンがならされて消えてしまったのであるから，B の位置の測定における不確定性 δx は $d/2$ よりも大きいはずである．したがって

$$\delta p\delta x\gtrsim\frac{h}{2} \tag{1-8}$$

となり，これは（大きさの程度において）通常の不確定性原理と一致する．

同様な解析は，前述の光散乱によってどちらの穴を電子が通ったかを決める実験装置についても行うことができる．このような解析によって，測定の不確定性の下限値を得ることができる．

以上のような実験を考察することによって，不確定性原理を“証明”したのではなく，不確定性原理の内容を明らかにしたにすぎない．不確定性原理が成り立つことの証拠を2つ挙げることができる．第一に，これまで誰も測定の限界を実験的にのりこえることができなかったことである．第二に，量子力学の法則が首尾一貫したものであるためには不確定性が要求されるように思われることである．実際，量

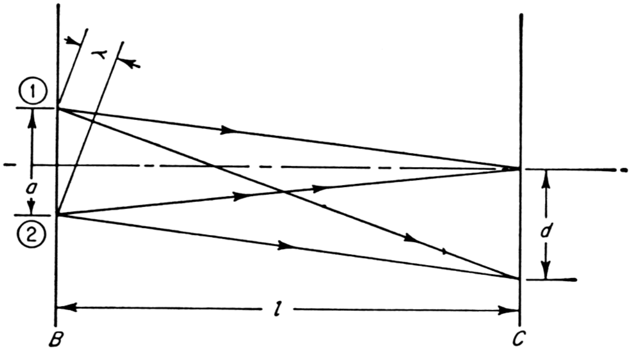


図1-6 同位相で穴1，2を出発した2本の光線は，B からスクリーン C に同じ時間かかって到達するならば，C において相加的に干渉する．したがって2つの穴を通ってきた光線の回折パターンの最大値はスクリーンの中心で起こる．スクリーンの下方に進むと，次の極大値は距離 d のところで起こる．これは，穴1からの光線が穴2からの光線と較べてちょうど1波長だけ長く飛行して到達する位置である．

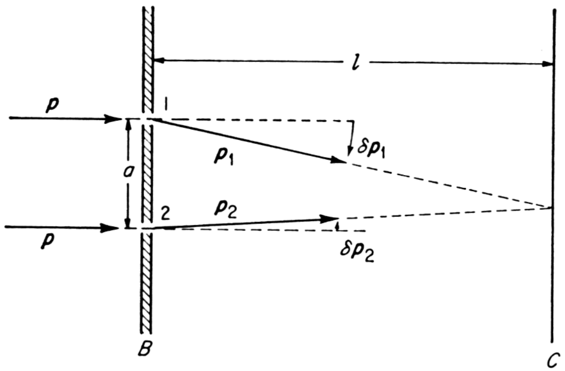


図1-7 スクリーン B の穴を通る電子の偏向は実際は運動量の変化 $\delta\boldsymbol{p}$ である．この変化によって，初めの運動量ベクトルに近似的に垂直な方向に運動量の成分が加えられることになる．エネルギーの変化は完全に無視できる．偏向角が小さいとき，運動量ベクトルの大きさは近似的ではあるが一定に保たれる．このとき，偏向角は非常によい近似で $|\delta\boldsymbol{p}|/|\boldsymbol{p}|$ で表される．2個の電子があって，一方は運動量 $\boldsymbol{p}_1$ で穴1から出発し，一方は運動量 $\boldsymbol{p}_2$ で穴2から出発して，共にスクリーン C 上の一点に到達するものとする．このとき，それぞれの偏向角の差は近似的に a/l である．どちらの穴を通って電子がやってきたのかわからないのだから，電子がスクリーン B を通るときに受けとる運動量の垂直成分の不確定性は，偏向角の不確定性と等価である．これより，$|\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}_2|/|\boldsymbol{p}|=|\delta\boldsymbol{p}|/|\boldsymbol{p}|=a/l$ という関係が得られる．

子力学の法則から予言されることは，くりかえしくりかえし高い精度で検証されてきている．

1-3　干渉する選択肢

2種類の選択肢　物理学的な立場から見ると，電子の通る2つの経路は独立な選択肢である．しかし，その確率が和 P_1+P_2 になると結論するのは誤りである．したがって，このような結論に到る前の仮定あるいは考え方が誤っているのである．思考の習慣というのはとりわけ強いものであるから，多くの物理学者にとって，考え方を否定するよりも，仮定を否定するほうが楽なのである．論理的に首尾一貫性がないと容易に行きづまってしまうので，それを避けるために物理学者は次のような見解をとる：電子がどちらの穴を通ったかを決める実験をしなければ，電子がどちらを通ったかをいうことができない．実験装置が電子の通る穴を決めるように作動している状況においてのみ，どちらの穴を通ったかをいうことができる．観察していれば，電子がどちらの穴を通ったかがわかるのであるが，観察していなければ，どちらを通ったかいえないのである！　自然を記述しようとするとき，論理の固い綱に沿って歩くことを自然は要求するのである．

このような考え方の代わりに，この本ではこの章の初めに述べたことを踏まえて古典的な考え方を否定することにする．すなわち，あらゆる選択肢の確率の和をとって確率を計算することをしない．確率を組みあわせる新しい規則を具体的にするためには，“選択肢”ということばのもつ2つの意味を明らかにするのが便利である．1つの意味は排中律の概念とかかわっている．穴1と2の一方が閉じている場合，あるいは，どちらの穴が使われているかを正確に決定する装置が作動している場合，2つの穴は**排反的選択肢**である．選択肢のもう1つの意味は，組み合わせ，あるいは干渉の概念と関係している（**干渉**ということばは，ここでは光学における干渉と同じ意味をもつ．すなわち，相加的干渉か，あるいは相殺的干渉のどちらかである）．したがって，穴1と2は，(1)ともに開いている場合と(2)どちらの穴を通ったかを決める実験を行わない場合，**干渉的選択肢**を表す．選択肢がこのように干渉的であるとき，確率法則は式（1-1）と（1-2）で考えられているような形に変化するのである．

干渉的選択肢の概念は量子力学のすべての基礎である．状況によっては，2種類の選択肢が共に存在することもある．2つの穴の実験において，電子がある場所，

たとえば，スクリーンの中心から1cm以内のところに到達する確率を求めるとしよう．この確率というのは，スクリーン上のあらゆるところに計測器を置いたときに(それぞれの計測器は電子が来ると閉じる）閉じた計測器が $x=0$ から1cm以内にあるという確率である．電子がどちらかの穴を通ってどれかの計測器に到達するのに，いろいろな可能性がある．穴のほうは干渉的選択肢であり，計測器のほうは排反的選択肢である．したがって，ある x に対して，初めに和 $\phi_1+\phi_2$ をとり，2乗して得られた確率を -1 cmから1cmまで x について積分する．

少し経験を積めば，どちらの種類の選択肢であるかを判断することはそれほどむずかしいことではない．たとえば，選択肢についての情報は得られる（または，結果を変えることなしに得られるようにすることができる）が，その情報は使われないものとする．この場合，通常の意味における確率の和は排反的選択肢についてとるべきである．排反的選択肢は，得られた情報によって別々に同定できるものである．

例 いくつかの選択肢が実験によって分離できない場合に，必ず干渉が起こる．驚くべき例の1つは，図1-8に示すように，重心系で90°に2つの核が散乱する場合である．A を α 粒子とし，B を他の原子核としよう．散乱のあと A が位置1に到達し，B が位置2に到達する確率を求めてみる．振幅を $\phi_{AB}(1,\ 2)$ とすると確率は $p=|\phi_{AB}(1,\ 2)|^2$ である．1に到達する粒子が B であるか A であるか区別しないとする．1に到達するのが B であれば，振幅は $\phi_{AB}(2,\ 1)$ である．[これは $\phi_{AB}(1,\ 2)$ と等しいはずである．なぜなら，90°の散乱であるから.] したがって，一方の原子核が1に到達し，他方の原子核が2に到達する確率は

$$|\phi_{AB}(1,\ 2)|^2+|\phi_{AB}(2,\ 1)|^2=2p \tag{1-9}$$

となる．確率の和をとったわけである．A が1に到達することと B が1に到達することとは排反的選択肢である．なぜなら，すでに起こっている散乱過程を乱すことなく，1にある原子核の特性を決定することが可能だからである．

しかし，A が α 粒子でかつ B も α 粒子であるときには何が起こるであろうか．その場合，粒子を分別する実験手段がないから，1に到達したのが A か B かを知ることができない．よって干渉的選択肢となり，確率は

$$|\phi_{AB}(1,\ 2)+\phi_{AB}(2,\ 1)|^2=4p \tag{1-10}$$

となる．この興味ある結果は実験的に容易に検証される．

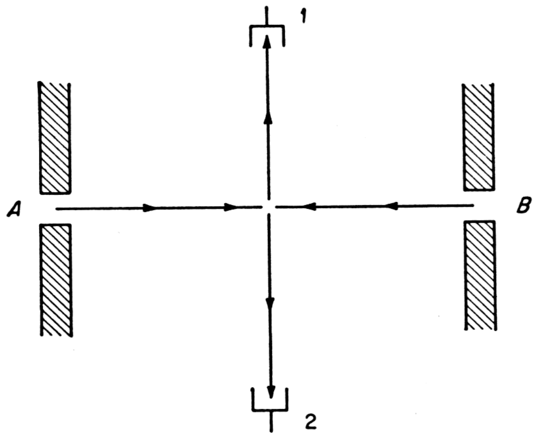


図1-8　重心系における核と核の散乱．2個の同種核の散乱では驚くべき干渉効果が起こる．この場合，2つの選択肢が干渉する．1に到達する粒子は A または B のどちらかから来たものである．2個の核が同種でない場合，1で核種の判定ができれば，どちらの選択肢が実際に起こったのかが決定できる．よって2つの選択肢は排反的選択肢であるから干渉効果は起こらない．

電子が電子を散乱するとき，結果は2つの点で異なる．第一に，電子は**スピン**と呼ばれる性質をもっている．1つの電子は**上向きスピン，下向きスピン**と呼ばれる2つの状態のうちの1つの状態にある．低エネルギーでの散乱では，第一近似でスピンは変化しないものとしてよい．スピンは磁気モーメントをもつ．低速では，主要な力は電荷による電気的力であり，磁気的影響はわずかの補正を与えるだけであるからこれを無視することにする．したがって，電子 A が上向きスピン状態で，B が下向きスピン状態であれば，スピンを測定することにより1に到達した電子がどちらであるかを知ることができる．もし上向きスピンならば A であり，下向きスピンならば B である．この場合の散乱確率は

$$|\phi(1,\ 2)|^2+|\phi(2,\ 1)|^2=2p \tag{1-11}$$

である．

しかしながら，もし A も B も上向きスピンの状態にあるならば，散乱後にどちらが A でどちらが B かを決定できないから散乱確率は

$$|\phi_{AB}(1,\ 2)+\phi_{AB}(2,\ 1)|^2=4p \tag{1-12}$$

となるように思われる．実際には，これは正しくない．おもしろいことに，電子は α 粒子の場合と異なる法則に従う．2 つの電子を交換すると振幅の位相が 180° ずれるのである．すなわち，両方とも上向きスピンの場合は，

$$|\phi_{AB}(1,\ 2)-\phi_{AB}(2,\ 1)|^2 \tag{1-13}$$

となる．90° 散乱の場合，$\phi_{AB}(1,\ 2)=\phi_{AB}(2,\ 1)$ であるから散乱振幅は 0 となる．

Fermi 粒子と Bose 粒子　電子の属性を交換したとき振幅の位相が 180° ずれるという規則は非常に奇妙で，自然がそのような規則をもつことの理由は完全にはわかっていない．電子以外にもこの規則に従う粒子がある．そのような粒子は Fermi 粒子と呼ばれ，Fermi 統計あるいは反対称統計に従うという．電子，陽子，中性子，ニュートリノ，μ 中間子は Fermi 粒子である．これらの粒子を奇数個もつ複合粒子も Fermi 粒子である．たとえば，窒素原子は 7 個の電子，7 個の陽子，7 個の中性子からなる．この 180° 則は Pauli によって初めて指摘されたもので，Pauli の排他律の量子力学的基礎である．この排他律は化学の周期律表の特性を決めている．

交換によって位相を変えない粒子は Bose 粒子と呼ばれ，また Bose 統計あるいは対称統計に従うという．Bose 粒子の例は，光子，π 中間子であり，α 粒子のように偶数個の Fermi 粒子からなる系もある（α 粒子は 2 個の陽子と 2 個の中性子からなる）．すべての粒子は Bose 粒子か Fermi 粒子かのいずれかである．これらの干渉的性質は深遠で不思議な効果をもつ．たとえば，液体ヘリウムは原子質量 4（Bose 粒子）の原子からなるが，1 ～ 2 K の温度で細い管を抵抗なしに流れることができる．しかし原子質量 3 （Fermi 粒子）からなる流体はこの性質をもたない*)．

粒子の同一性の概念は，古典力学と較べると量子力学において完全かつ確定的である．古典力学においては，同一のように見える粒子はほとんど同一であるか，あるいは実際上は同一であると考える．というのは，非常に近い性質のものであれば，現実の実験技術で相違を検出することが不可能だからである．しかしながら，古典力学においては将来の技術の進歩で相違をはっきりさせる可能性が残されている．しかしながら，量子力学においては，状況は異なる．粒子が完全に識別不可能であるかどうかを直接ためすことができる．

図1-8に示した実験において，A と B から出発する粒子が近似的にのみ同一であ

---

*）　${}^3H_e$ も超電導における Cooper 対のように対になって超流動を示すことが知られている．

るとする．実験技術を改良すれば，たとえば，1に到達する粒子の性質を調べることによりそれが A から来たのか B から来たのかを決めることができる．この状況では，2つの初期位置の選択肢は排反的であり，これらの選択肢を記述する振幅の間に干渉は存在しない．ここで大事なことは，粒子の性質を調べることは，散乱が起こったあとで行われていることである．これは，観測が散乱過程に影響を及ぼすことがないことを意味し，したがって，選択肢の間に何ら干渉を期待できない，ということ(すなわち，1に到達する粒子は A から来た粒子か B から来た粒子かのいずれかである，ということ）を意味する．粒子が同一の場合，不確定性原理により，これらの可能性の間を区別する方法が原理的にも存在しない，と結論しなければならない．すなわち，ある粒子が1に到達したとき，その粒子が A から来たのか B から来たのかを決定することは，どんなテストを行っても，現在も未来も全く不可能なのである．このような厳密な同一性の意味において，すべての電子は同一であり，すべての陽子もまた同一なのである．

第二の例として，結晶から中性子が散乱される場合を考えよう．結晶の原子間隔よりもやや長い波長の中性子が結晶中の原子によって散乱されるとき，非常に強い干渉が生じる．X線の場合と同じように，Braggの反射の法則によって決まるある離散的な方向にのみ中性子が出てくる．この例に現れる干渉的選択肢は，ある特定の中性子を散乱する原子がどれであってもよいという可能性の選択肢である（ここで，どれか1つの原子によって散乱される中性子の振幅は微小であり，中性子が2個以上の原子によって散乱される可能性を考えなくてもよい)．それらの原子から出発する中性子の運動を記述する振幅の波は，ある特定の方向にのみ相加的に干渉する．

この単純そうな描像に興味ある複雑さを導入してみよう．中性子は電子と同じようにスピンをもち，上向きスピンと下向きスピンという2つの状態で記述される．散乱物質は，^{13}C のように，似たスピンの性質をもつ原子によってできているものとする．この場合，実験を行うと2つの異なるタイプの散乱を生じる．前述のような離散的方向の散乱の他にあらゆる方向への散慢散乱も起こる．なぜこのようなことになるのだろうか．

次のように考えると，これら2つのタイプの散乱の原因が理解できる．実験に使う中性子は全部上向きスピンの状態にあるようにしておく．散乱して出てくる中性子のスピン方向を解析すると，ある中性子は上向きスピンの状態にあり，ある中性

子は下向きスピンの状態にあるであろう．上向きスピンをもつ中性子は離散的なBragg角の方向にのみ散乱し，スピン状態を変えた中性子は全方向に散慢散乱する．

中性子のスピンが上向きから下向きに反転するためには，角運動量保存則により，散乱体である核のスピンが下向きから上向きに変わらなければならない．したがって，原理的に，ある特定の中性子を散乱する核がどれであるかを決定できるのである．また原理的に，実験の前に結晶中のすべての散乱核のスピン状態を記録できるとすれば，中性子が散乱されたあと，結晶を調べてどの原子核がスピンを下向きから上向きに反転させたかがわかる．もし結晶中のどの原子核もそのようなスピン反転をしなかったとすれば，中性子もスピン反転しなかったのであり，中性子がどの原子核によって実際散乱されたのかはわからない．この場合に，選択肢は干渉しあい，Braggの散乱条件に従って散乱されることになる．

他方，1つの結晶原子核のスピンが反転したときには，この原子核が中性子を散乱したことがわかる．この場合，干渉事象とならない．この特定の原子核から出てくる球面波は，散乱された中性子の運動を記述する．この原子核から出てくる波だけが記述の中に現れるのである．この場合，すべての方向に等しい可能性をもって中性子は散乱される．

結晶中のすべての原子核を調べてどの原子核がスピン状態を変えたのかを見ることは，わらの山から針をさがし出すようなものであることには違いないが，自然は実験の実際上の困難にはお構いなしである．重要なことは，散乱された中性子を乱すことなく，どの原子核が実際に中性子を散乱したか（もちろんスピン状態が変わる場合であるが）を原理的に決定できるということである．この可能性が存在することにより，実際的にこの決定ができないとしても，事態は排反的選択肢（すなわち非干渉的選択肢）であることになる．

一方，中性子のスピン状態が変化しない状況で選択肢の間に干渉が起こるということは，散乱した結晶原子核を特定することが原理的にさえ不可能であるということを意味するのである．すなわち，少くとも散乱の前後の状況を乱すことなく特定することは不可能なのである．

1-4　確率概念のまとめ

選択肢と不確定性原理　この序章の目的は，量子力学における確率振幅の意味とその重要性を説明し，この振幅を取り扱う規則を議論することであった．それゆえ，確率振幅という量が存在し，ある事象が自然界に生じる方法と関わっていることを示してきたのである．たとえば，S（図1-1）にある線源から x にある検出器に進む電子は，B にあるスクリーン上の穴1を通ってこの行程を完了する場合の振幅と，穴2を通る場合の振幅との2つの振幅をもつ．さらに，それぞれの選択肢の振幅を加えることにより，全部の事象に対応させることができる．このようにして，たとえば，x に到達することの全振幅は式（1-2）で与えられたように

$$\phi=\phi_1+\phi_2 \tag{1-14}$$

である．

次に，全振幅の絶対値の2乗をその事象が起こる確率として解釈する．たとえば，電子が検出器に到達する確率は

$$P=|\phi_1+\phi_2|^2 \tag{1-15}$$

である．その事象が完了する前に，その事象に関与している粒子の状態を観測して事象を中断させてしまうと，その全振幅の構成を撹乱することになる．つまり，粒子の系がある特定の状態にあることを観測すると，その系が他の状態にある可能性を排除したことになり，排除された状態に付随した確率振幅は全振幅の計算には加えられないのである．たとえば，ある種の測定装置を用いて電子が穴1を通ると断定したとすると，検出器に到達する振幅は ϕ_1 そのものである．このことは，この測定装置がはたらいているかぎり，われわれが実際に測定結果を見て記録するか否かには無関係である．明らかに，お望みならば，いつでも結果を見ることができるのだから．測定装置がはたらいているだけで，系とその確率振幅を撹乱するのに十分なのである．

この上記の事実は Heisenberg の不確定性原理の基礎である．すなわち，いかなる実験の微妙さまたはいかなる測定の精度にも自然の限界が存在するということである．

振幅の構造　ある事象の振幅は，その事象が起こるいろいろな選択肢の振幅の和である．このことから，それらの選択肢をどのように分類するかによって，振幅の解

析にいろいろなやり方がある．最も詳細な解析においては，たとえばある与えられた時間間隔に A から B に行く粒子はある運動(位置と時刻)すなわち時間空間における経路を通って行くものと考える．したがって，それぞれの可能な運動に対して1つの振幅を決めるのである．全振幅はそれぞれの経路の寄与の和となる．

この考え方は，2つの穴に関する実験を考察することによって明解となる．線源と穴の間にさらに2つのスクリーンを置くことにしよう．これらのスクリーンを D，E と呼ぶことにする．それぞれに穴をいくつか開け，D_1，D_2，……，および E_1，E_2，…… と名づける (図1-9)．簡単のために，電子は xy 平面上を動くものとする．このとき，電子が線源を出てスクリーン B の穴に行く経路はいくつかある．線源を出て D_2 を通り E_3 を通って穴1に到ることもできるし，また線源を出てから D_3，E_1 を通って穴1に到る，などである．それぞれの経路は固有の振幅をもつ．全振幅はそれらすべての和である．

次に，スクリーン D と E に穴をさらに開けてスクリーンがひとかけらもなくなってしまうようにする．図1-10に示されているように，電子の経路は，すでになくなっているスクリーン D の位置 y_D を電子が通る高さ x_D と，y_E における高さ x_E によって特徴づけられる．x_D，x_E の組に対して1つの振幅が対応する．重ねあわせの原理はここでも成り立ち，x_D と x_E の可能な値について振幅の和(積分)をとらなければならない．

明らかに，次になすべきことは，粒子源と穴1の間にもっとたくさんのスクリー

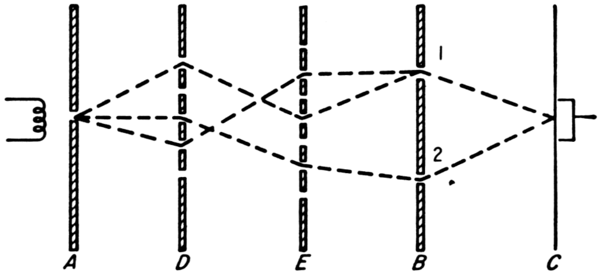


図1-9 粒子源とスクリーン A の間に置かれたスクリーン D，E に穴をいくつか開けた場合，それぞれの電子に対していくつかの道が可能となる．おのおのの道に対して1つの振幅が対応する．これらすべての穴が開いているときの結果を説明するには，それぞれの可能な道に対応する振幅をすべて足しあわせなければならない．

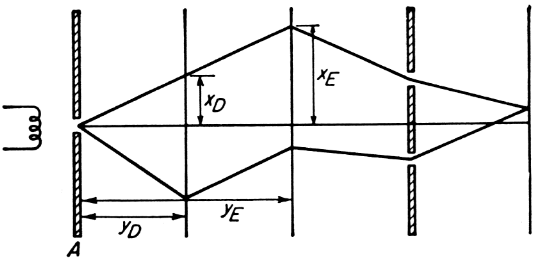


図1-10　y_D と y_E にあるスクリーンにもっと多くの穴を開けるものとする. 実際上, スクリーンは穴だらけになり, 電子が通り抜けることのできる場所はスクリーン上に連続的に分布しているものとみなせる. この場合, 選択肢の和は, 電子が y_D と y_E におけるスクリーンを通過する場所を記述する連続パラメーター x_D, x_E についての二重積分となる.

ンを置き, それぞれのスクリーンにたくさん穴を開けてスクリーンをなくしてしまうことである. このような過程を通して, 電子の経路の定義を精密化しつづけていくと結局, 経路は距離の関数として表わした高さ $x(y)$ のことである, という意味ある概念に到るのである. また, 重ねあわせの原理も適用しつづけてゆくと, それぞれの経路の振幅をあらゆる経路について積分するということになる.

さて, われわれは運動をさらに精密に特定することができる. 空間における特定の経路 $x(y)$ を考えることができるだけでなく, その経路が空間の各点を通る時刻も与えることができる. すなわち, 2 つの関数 $x(t)$, $y(t)$ が与えられれば 1 つの経路 (今 2 次元の場合を考えている) が与えられるのである. このようにして, ある特定の経路 $x(t)$, $y(t)$ をとる振幅という概念が得られる. あるところに到達することの全振幅はあらゆる可能な経路について振幅の和をとったものである. あらゆる経路についての和や積分を数学的にもっと精密な方法で定義する問題については第 2 章で扱うことにする.

第 2 章は任意に与えられた経路の振幅についての公式を含む. この公式が与えられると, 非相対論的量子力学の法則は完全に記述され, 残されたことはその法則を多くの興味ある特殊な場合に応用することである.

1-5 残された思考上の問題点

後に見るように，量子力学において振幅 ϕ は完全に決定論的な方程式(Schrödinger 方程式)の解である．$t=0$ における ϕ が知られているならば，後のあらゆる時刻における振幅の値を知ることができる．$|\phi|^2$ をある事象の確率として解釈することは非決定論的な解釈である．その解釈によれば，実験の結果は完全には予言できないからである．この解釈が首尾一貫性に問題を起こさないことは驚くべきことである．これが正しいことは，多くの特殊な状況を解析することにより，Heisenberg, Bohr, Born, von Neumann など多くの物理学者によって示されてきた．これらの解析にもかかわらず，首尾一貫性をもつという事実は完全には明白なことでない．この理由のゆえに，量子力学は初心者にとってむずかしくかつなにか神秘的な学問なのである．いろいろと例を試みているうちにこの神秘さは次第に消えてゆくのであるが，この学問にはなにかおかしなところがあるという感じを完全に拭い去ることができないのである．

研究するに値する解釈上の問題はいくつか残っている．これらは完全に研究しつくされるまで定式化するのが困難な問題である．ϕ の確率的解釈が**唯一の**首尾一貫性をもつ解釈であることを示さなければならない．われわれ自身もわれわれの測定装置も自然の一部分であるから，原理的には，決定論的方程式を満たす振幅関数で記述されるのである．与えられた実験に対して特定の結果が得られる確率しか予言できないのはなぜであるか？　不確定性の原因は何か？　ほとんど明らかなことは，不確定性は，個々の原子的事象の効果を増幅して大きな系によって観測されるようなレベルにする必要性からきているのである．この詳細は $|\phi|^2$ が確率であるという仮定のみに基づいて解析されてきており，この仮定の首尾一貫性は示されている．首尾一貫性をもつ他の解釈は**ない**ことを示すことは興味ある問題であろう．

もっと研究すべき他の問題は，知識論（認識論）的問題である．たとえば，われわれの認識では時間の対称性が欠けているように見える．われわれの過去の認識は未来の認識と定性的に異なる．過去の事実の確かさがよく言及される一方，どうして未来の事象の確率だけがもっともらしく思われるのか．これらの問題もずいぶん解析されてきた．しかしながら，さらに状況を明らかにするようなことはあまりない．明らかに，くりかえしていうと，われわれ自身および測定装置のサイズが大きいことによる帰結を考えるべきなのである．量子力学における観測の問題を解析す

るのに通常は観測者と被観測物との分離を行うが，これは必ずしも必要でないはずであるし，このことはもっと徹底的に解析されるべきなのである．必要と思われるのは，増幅装置に関する統計力学である．

もちろん，そのような問題の解析は哲学的問いかけの性質をもつものであるが，物理学をさらに発展させるのに必要ではない．われわれは ϕ についての首尾一貫した解釈をもっているのであるし，疑いなく，これが唯一の首尾一貫した解釈である．今日の問題はむしろ，原子核と中間子を含む現象について ϕ のふるまいを決める法則を発見することである．ϕ の解釈はおもしろいが，もっと重要な問題は次のようなものである．原子核の大きさ以内で起こる現象を解析するために，どのような思考の新しい変更が必要となるのか？

1-6　この本の目的

これまで，量子力学の法則がとるべき形式を与えてきた．すなわち，確率振幅が存在する，ということである．そして，この振幅を計算するための1つの可能な方法を概説した．他にも定式化の方法がいくつかある．もっと通常の量子力学の方法では，振幅はある種の波動方程式を解くことによって計算される．低速の粒子に対して，波動方程式は Schrödinger 方程式と呼ばれる．光速に近い任意の速度をもつ電子に対してもっと正確に成り立つ方程式は Dirac 方程式である．この場合，確率振幅はある種の超複素数（複素数値のベクトル）である．この本では，Dirac 方程式は議論しないし，スピンの効果も調べない．その代わりに，われわれの注意を低速の電子に限定し，Maxwell 方程式によって振る舞う粒子である光子を研究することにより，量子電気力学の方向にいくらか研究の地平を拡げることにする．

この本では，いくらか伝統的でない方法によって，非相対論的問題に対する確率振幅を計算する法則を与える．ある意味で，量子力学の概念的理解のためにはこのほうがよいのであるが，多方，単純な問題について計算をしたりまた文献を理解するためには役立たない．

Schrödinger 方程式による伝統的な見解はすでに多くの本に書かれているが，ここで述べようとする見解は学術雑誌の論文の中に簡略化した形で著されているにすぎない*)．本書の中心的目的は，研究を集めて1冊の本にし，十分な明快さをもって

---

*) R.P. Feynman, The Space-Time Approach to Non-relativistic Quantum Mechanics, *Rev. Mod. Phys.* **20** 367 (1948).

詳しく述べることにより，興味ある読者に使っていただくことである．

本書の主題を限定するために，量子力学を完全に展開することはしない．その代わりに，他の本に出ている伝統的な議論で主題を展開させることができるところでは，それらの本を引用することにした．このような不完全さのため，この本は量子力学の完全な教科書としては役立たない．Schrödinger 方程式，行列力学，量子力学の応用などを扱っている他の本と一緒にこの本を用いるならば，主題の考え方のよい入門となる．

他方，量子力学のすべてを詳細にわたって展開しないことで浮いたスペースを使って，量子力学の定式化に用いた数学的方法を他の物理学の分野に応用することを考えることにする．

もっと複雑な粒子，すなわち，中性子，陽子，中間子が関わる過程の振幅を厳密に計算する方法を発見することは将来の課題である．もちろん，未知の法則が発見されたときに，振幅を計算できるかどうかは疑わしいかも知れない．しかし，今日の状況は量子力学が発見される以前の状況と類似であるとは思われない．

1920年代には，古典力学の基本的な定理や概念が正しくないことを示す例がたくさんあった．すなわち多くのパラドックスがあった．力の具体的な形によらずに成り立つべき一般法則があったが，それらのいくつかは実際成り立たなかった．たとえば，それぞれのスペクトル線は原子の自由度を示し，温度 T でそれぞれの自由度はエネルギー kT をもち比熱に R の寄与をすべきであった．しかし，巨大な数のスペクトル線から期待される大きな比熱は現れなかった．

今日，振幅の重ねあわせの原理から導かれる一般的法則はいずれも成り立っているように見える．しかし，詳細な相互作用はとらえ難い．このことから，将来の理論においても振幅の概念は存在しつづけるが，計算の方法は全く別なものとなる可能性がある．

第2章　量子力学の運動法則

この章では，第1章で始めた非相対論的量子力学の定式化を完成させる．第1章でそれぞれの軌道に対して振幅が存在することを述べた．ここではそれぞれの軌道に対する振幅の形を求める．しばらくの間，簡単化のために粒子が1次元的に運動する場合に限定することにする．すなわち任意の時刻における位置は t の関数である座標 x によって与えられるものとする．経路というのは関数 $x(t)$ のことを指す．

粒子が初期時刻 t_a に位置 x_a から出発し時刻 t_b に終点 x_b に到達する場合，単純に，粒子は a から b に行く，ということにする．関数 $x(t)$ は $x(t_a)=x_a$，$x(t_b)=x_b$ という性質をもつ．量子力学では a から b に到る振幅を考え，これを**核**と呼び $K(b, a)$ と書く．これは端点 a，b の間のすべての軌道からの寄与の和をとったものである．このことは古典力学における状況と対照的である．古典力学では a から b に行く経路は**古典軌道**と呼ばれる唯一の特別な軌道だけがある．これを $\bar{x}(t)$ と表すことにする．量子力学の場合の法則を述べる前に，古典力学の状況を復習することにしよう．

2-1　古典的作用関数

あらゆる可能な経路の中から特別な経路 $\bar{x}(t)$ を決める条件を表現するもっともエレガントな方法の1つは**最小作用の原理**である．すなわち，それぞれの軌道について計算可能なある量 S が存在し，古典軌道 $\bar{x}$ は S を最小にするものである．実際の条件は S が極値をもつことである．いいかえると，経路 $\bar{x}(t)$ がわずかに変化しても1次で S の値が変化しないことである．

S は次の表式で与えられる．

$$S=\int_{t_a}^{t_b} dt\ L(\dot{x}, x, t) \tag{2-1}$$

ここで L は系のラグランジアンである．位置と時間の関数であるポテンシャル $V(x, t)$ の場の中で運動する粒子に対してラグランジアンは

$$L=\frac{m}{2}\dot{x}^2-V(x,t) \tag{2-2}$$

である．極値経路 $\bar{x}(t)$ の形は通常の変分法で決定される．すなわち，経路を $\delta x(t)$ だけ $\bar{x}(t)$から変化させてみる．端点が固定されているという条件により

$$\delta x(t_a)=\delta x(t_b)=0 \tag{2-3}$$

となる．$\bar{x}(t)$ が S の極値を与えるという条件は $\delta x(t)$ の 1 次で

$$\delta S=S[\bar{x}+\delta x]-S[\bar{x}]=0 \tag{2-4}$$

となることを意味する．式(2-1)の定義を用いると次のように書くことができる．

$$\begin{aligned} S[x+\delta x]&=\int_{t_a}^{t_b}dt\ L(\dot{x}+\delta\dot{x},x+\delta x,t)\\ &=\int_{t_a}^{t_b}dt\left[L(\dot{x},x,t)+\delta\dot{x}\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}+\delta x\frac{\partial L}{\partial x}\right]\\ &=S[x]+\int_{t_a}^{t_b}dt\left(\delta\dot{x}\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}+\delta x\frac{\partial L}{\partial x}\right) \end{aligned} \tag{2-5}$$

部分積分をすると，S の変分は

$$\delta S=\delta x\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}\bigg|_{t_a}^{t_b}-\int_{t_a}^{t_b}dt\ \delta x\left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}\right)-\frac{\partial L}{\partial x}\right] \tag{2-6}$$

となる．端点で δx は 0 であるから，この式の右辺の第 1 項は 0 である．両端点の間では，$\delta x(t)$は任意の値をとることができる．したがって，次の条件を常に満たす曲線が極値を与える．

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}\right)-\frac{\partial L}{\partial x}=0 \tag{2-7}$$

これは，もちろん，古典的なラグランジュ方程式である．

古典力学において，作用積分 $S=\int L dt$ は，単に極値 S_{cl} であるというだけでなく興味あるものである．なぜなら最小作用の経路を決定するために，近接する経路に沿っての作用も知る必要があるからである．

量子力学では作用積分の形とその極値との両方が重要である．以下の問題でいろいろな状況における極値を評価する．

問題 2 - 1　自由粒子の場合 $L=m\dot{x}^2/2$ である．自由粒子の古典的運動に対する作用 S_{cl} が

$$S_{cl}=\frac{m}{2}\frac{(x_b-x_a)^2}{t_b-t_a} \tag{2-8}$$

であることを示せ．

問題 2-2　調和振動子の場合 $L=(m/2)(\dot{x}^2-\omega^2 x^2)$ である．$T=t_b-t_a$ として古典的作用が

$$S_{cl}=\frac{m\omega}{2\sin\omega T}[(x_a^2+x_b^2)\cos\omega T-2x_a x_b] \tag{2-9}$$

であることを示せ．

問題 2-3　一定の力 F の下にある粒子（$L=m\dot{x}^2/2-Fx$）に対して S_{cl} を求めよ．

$$S_{cl}=\frac{m}{2T}(x_b-x_a)^2-\frac{FT}{2}(x_a+x_b)-\frac{T^3F^2}{24m}$$

問題 2-4　古典力学で，運動量は

$$p=\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \tag{2-10}$$

で定義される．端点での運動量が

$$\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)_{x=x_a}=-\frac{\partial S_{cl}}{\partial x_a} \tag{2-11}$$

であることを示せ．ヒント：端点の変化に対して式(2-6)がどのように変わるかを考えよ．

問題 2-5　古典力学で，エネルギーは

$$E=-L+\dot{x}p \tag{2-12}$$

で定義される．端点でのエネルギーが

$$-L(x_b)+\dot{x}_b\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)_{x=x_b}=-\frac{\partial S_{cl}}{\partial t_b} \tag{2-13}$$

であることを示せ．ヒント：経路はすべて古典的経路であるから，端点の時刻を変化させると経路も変化する．

2-2　量子力学的振幅

ここで量子力学の法則を与えることができる．それぞれの軌道が a から b に行く全振幅にどれだけ寄与するかをいわなければならない．作用の極値を与える特別な経路のみが寄与するのでなく，すべての経路が寄与する．全振幅に対する寄与は，同じ大きさであるが異なる位相をもつ．ある 1 つの経路がもつ位相は，その経路の作用 S を作用量子の単位 $\hbar$ で割ったものである．以上をまとめると次のようになる．時刻 t_a において点 x_a から出発し t_b で x_b に到る確率 $P(b,a)$ は a から b に到

る振幅 $K(b,a)$ の絶対値の 2 乗 $P(b,a)=|K(b,a)|^2$ である．この振幅 $K(b,a)$ はそれぞれの経路からの寄与 $\phi[x(t)]$ を足しあわせたものである．

$$K(b,a)=\sum_{\substack{a\text{ から }b\text{ にいた}\\ \text{るすべての経路}}}\phi[x(t)] \tag{2-14}$$

1 つの経路の寄与は作用 S に比例する位相をもつ．

$$\phi[x(t)]=(\text{定数})\times e^{(i/\hbar)S[x(t)]} \tag{2-15}$$

作用 S は，対応する古典系の作用である［式(2-1)を見よ］．便宜上，定数は K を規格化するように決める．後に式(2-14)の経路についての和の意味をもっと数学的に議論するときに，この定数について考える．

2-3　古典的極限

数学をもっと完全なものにする前に，この量子力学の法則を古典力学の法則と比較してみよう．(2-15)を一見したところ，すべての経路は位相が違っていても同じように寄与をしているので，どうして古典的極限においてある特別の経路が特に重要となるのかが明らかでない．古典近似というのは，長さ，質量，時間などが大きくて $\hbar\,(=1.05\times10^{-27}\,\mathrm{erg\cdot sec})$ に較べて S が非常に大きい場合に対応する．このとき，位相 $S/\hbar$ は，非常に大きな角度になる．ϕ の実数部（虚数部）はこの角度の余弦関数（正弦関数）であり，正にもなるし，負にもなる．図2-1に示すように，経路をわずかな量（古典力学の尺度での微小量）δx だけ動かすと，S の変化も古典力学の尺度で微小量であるが，微小単位 $\hbar$ で計るときには微小量でない．経路のわずかな変化は一般的に大きな位相の変化を与えるので，余弦関数や正弦関数は正と負の値の間を非常に激しく振動する．全体の寄与はこれらが足しあわさって 0 となる．なぜなら，ある経路が正の寄与をするとすれば，(古典力学の尺度で)微小量だけ異なる経路は同量の負の寄与をするので，あわせた寄与は 0 となるからである．

したがって，近接する経路が異なる作用をもつ場合に，それらの経路を考慮する必要がない．近接する経路が互いに寄与を打ち消しあうからである．しかし，S が極値をもつような特別な経路 $\bar{x}$ の場合には，経路をわずかに変えても，少なくとも 1 次で S は変化しない．この領域にある経路の寄与はほとんどすべて同位相 S_{cl} であるので打ち消しあわない．したがって $\bar{x}$ の近傍の経路からのみ重要な寄与が得られる．古典的極限ではこの特別な経路を重要なものとして考慮すればよい．このようにして古典力学の運動法則は量子力学の法則から導かれるのである．

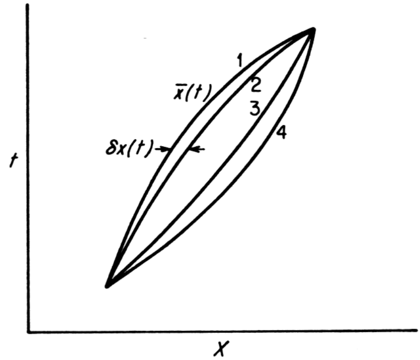


図2-1　古典的経路 1 は $\bar{x}(t)$ で表され，作用 S という積分量が最小となるものである．経路が $\delta x(t)$ だけ変化して経路 2 になったとすると，積分 S は 1 次まででは何も変化しない．これより運動方程式が決まる．

量子力学では a から b へ行く振幅は，干渉的選択肢の経路の振幅の和である．1 つの経路の振幅は $e^{iS/\hbar}$ であり，作用に比例する位相をもつ．

作用が $\hbar$ と比較して非常に大きいとする．3，4 のような近接する経路の作用はわずかに異なるが，$\hbar$ が小さいために，位相は非常に異なるので，寄与は打消しあう．古典軌道の近傍においてのみ，経路の変化に対して位相の変化はわずかであるので，近接する経路 1，2 は同じ位相で寄与し相加的に干渉する．それゆえに古典力学において経路 $\bar{x}(t)$ のみを考える近似は，作用が $\hbar$ に比較して大きい場合に正当化されるのである．

$\bar{x}$ と異なる軌道でも，その作用と S_{cl} との差が $\hbar$ 以内であると振幅に寄与する．この広がりのぶんだけ古典的軌道は不確定となる．この法則より，古典的に定義された軌道の精度の限界が与えられる．

次に，端点 (x_b, t_b) の位置に対して位相がどのように依存するか考えよう．端点をわずかに変えると，この位相は大きく変わり $K(b, a)$ も急速に変化する．S_{cl} のように，その独立変数が古典的尺度で有限な変化をしたときのみ変化する関数を「滑らかな関数」と呼ぶことにすると，$K(b, a)$ は滑らかとは程遠い関数であるが，古典的極限では上の議論から

$$K(b, a) = (\text{滑らかな関数}) \times e^{(i/\hbar)S_{cl}} \tag{2-16}$$

という形の関数であることがわかる．

これらの近似理論は古典力学が有効と思われるスケールの状況 $(S \gg \hbar)$ に適用できる．しかし，原子のレベルでは S は $\hbar$ 程度であり式(2-14)においてすべての軌道

についての和を詳細にとらなければならない．どれかの特別な軌道が圧倒的に重要となるというのでないので，もちろん，式(2-16)は必ずしもよい近似とならない．このような場合を扱うために，式(2-14)のような和を計算する方法を見つけなければならない．

2-4　経路の和

Riemann 積分との類似　それぞれの経路の寄与の和をとるという考えは定性的には明らかであるが，その和を数学的に精密に定義することが必要である．経路の数は高次の無限大であるから，経路の空間にどのような測度を与えるべきかは明らかでない．この数学的定義を与えるのがこの節の目的である．この定義は実際の計算のためには扱いにくいものである．後の章では経路についての和を計算するための他のもっと能率のよい方法を示す．本節については，数学的なむずかしさ（むしろ美しさのなさ）のために，読者が物理的内容を見失うことのないことを希望する．

通常の Riemann 積分を考察することから始めよう．大雑把にいって，ある曲線の下の面積 A は曲線の縦座標の和である．もっと正確にいうと，その和に比例している．考え方を精密にするために次のことをする．すべての縦座標の集合をとる（たとえば，等しい間隔での縦座標をとる）．それらを足しあわせると

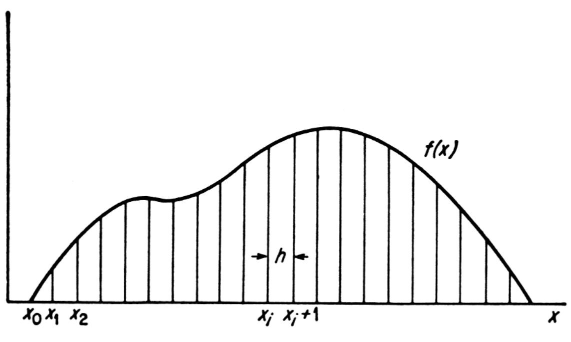


図2-2　通常の Riemann 積分の定義では，横軸から曲線まで多数の縦線を引く．縦線の間隔は h である．積分（すなわち曲線と横軸の間の面積）は縦線の長さの和に h を掛けたもので近似される．h が 0 に近づくとき，この近似は正しい値に近づく．
　経路積分に対しても同様の定義が用いられる．極限操作において 0 になる量は，経路上の離散的点の間の時間間隔 ε である．

$$A \sim \sum_i f(x_i) \tag{2-17}$$

が得られる．ここで和は図2-2に示したように点 x_i の有限集合についてとる．

次の段階は，点の部分集合すなわち縦座標の部分集合がもっと完全になったときのその和の極限として面積 A を定義する．しかしながら，むしろ，この有限集合が完全集合のよい表現となる，というべきであろう．なぜなら有限集合は決して無限連続体と同程度の測度をもつ部分集合とはならないからである．この極限を求めるのに，h をどんどん小さくしてゆくという通常の方法をとる．ところがそうすると，それぞれの h の値に対して和の値が異なる．極限が存在しないのである．この操作の極限を得るために，h に依存する規格化因子を決めなければならない．もちろん，Riemann 積分の場合，この因子はちょうど h そのものである．このようにすると極限が存在し

$$A = \lim\left[h \sum_i f(x_i)\right] \tag{2-18}$$

という表式になる．

和の構成　類似の手続きですべての経路についての和を定義する．まずすべての経路の部分集合を選ぶ．そのために独立変数である時間を，幅 ε の小区間に分ける．これにより t_a と t_b の間に間隔 ε で存在する時刻 t_i の集合が得られる．それぞれの時刻 t_i で特定の点 x_i を選ぶ．このようにして選んだ点を直線で結ぶと1つの経路が構成される．このようにして構成されたすべての経路についての和を定義するには，x_i $(i=1,\ \cdots\cdots,\ N-1)$ について多重積分を行えばよい．ここで

$$N\varepsilon = t_b - t_a,\quad \varepsilon = t_{i+1} - t_i,\quad t_0 = t_a,\quad t_N = t_b,\quad x_0 = x_a,\quad x_N = x_b \tag{2-19}$$

とおく．得られる式は

$$K(b, a) \sim \iint \cdots \int dx_1\, dx_2 \cdots dx_{N-1}\, \phi[x(t)] \tag{2-20}$$

である．x_0 と x_N については積分をしない．なぜならこれらは固定した端点 x_a，x_b だからである．この式は形式的に式(2-17)に対応する．今の場合，ε を小さくとることにより a と b の間のすべての経路の完全集合に近づくことができる．しかしながら，Riemann 積分の場合と同様に，この操作の極限をとることができない．なぜなら，極限が存在しないからである．ここでも前と同様に，ε に依存するある規格化因子を導入しなければならない．

あいにくなことに，そのような規格化因子を定義することは非常にむずかしい問題のようであり，一般的にどのようにすればよいのか明らかでない．しかしこれまでのところ実際的価値のありそうな状況については，どのように定義を与えるべきかわかっている．たとえば，ラグランジアンが式 (2-2) で与えられている場合について，規格化因子は A^{-N} である．ここで

$$A=\left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{1/2} \tag{2-21}$$

後で（たとえば，4-1節）どのようにしてこの結果が得られるかを示す．この因子を用いると極限が存在し

$$K(b,a)=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{A}\iint\cdots\int\frac{dx_1}{A}\frac{dx_2}{A}\cdots\frac{dx_{N-1}}{A}e^{(i/\hbar)S[b,a]} \tag{2-22}$$

と書くことができる．ここで

$$S[b,a]=\int_{t_a}^{t_b}dt\ L(\dot{x},x,t) \tag{2-23}$$

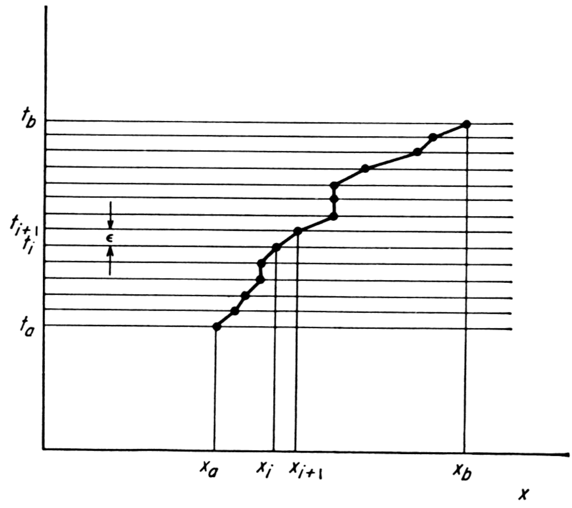


図2-3　経路についての和は次のような極限として定義される．まず，非常に小さい間隔 ε 各時刻において座標 x を特定する．次に経路の和はこれらの座標についての和となる．正しく積分量を求めるには，$\varepsilon\to 0$ という極限をとる．

は，図2-3に示すように点 x_i を線分で結んで得られる軌道についての線積分である．

経路をもっとエレガントに定義することができる．点 i, $i+1$ を直線で結ぶ代わりに古典的軌道で結ぶこともできる．そうすると S は,特定の点 $(x_i, t_i)(i=0, 1, \cdots, N)$ を通るすべての経路についてのラグランジアンの積分（作用）の極小値である．この定義を用いると任意の直線に戻って考える必要はない．

経路積分　a と b の間のすべての経路の部分集合を定義する方法はいろいろある．ここでわれわれが用いた特別な定義はある数学的目的のために最良のものではないかも知れない．たとえば，ラグランジアンが x の加速度にも依存するものとしよう．前に経路を構成した方法では，速度はそれぞれの点（x_i, t_i）で不連続である．すなわち，加速度はこれらの点で無限大になる．この状況が問題を引き起こす可能性がある．しかしながら，われわれが経験したいくつかの例では

$$\ddot{x}=\frac{1}{\varepsilon^2}(x_{i+1}-2x_i+x_{i-1}) \tag{2-24}$$

という置き換えは適切であった．このような置き換えが不可能かあるいは不適切であって経路についての和の定義がこのままでは使いにくいという場合もありうる．そのような状況は通常の積分の場合にも起こり，そのときは式（2-18）のような Riemann の定義が不適切で Lebesgue 積分のような別の定義を用いる必要がある．

積分の方法を定義しなおす必要があるといっても，積分の概念そのものが否定されるわけではない．式（2-22）で与えられているようなすべての経路についての和の特別な定義が扱いにくい場合には，新しい定義を定式化する必要がでてくるものと思われる．しかしながら，すべての経路についての和の概念は，通常の積分の概念と同様に，定義の仕方と独立であって，特定の定義が不十分な場合でも概念自体は有効である．したがって，ややあいまいな表現を用いて，すべての経路についての和を

$$K(b, a)=\int_a^b \mathcal{D}x(t)\ e^{(i/\hbar)S[b,a]} \tag{2-25}$$

と書くことにする．これを**経路積分**と呼ぶ．経路についての和を表しているのは $\mathcal{D}x(t)$ である．今後，式（2-22）の表式に戻ることはほとんどしない．

問題 2 - 6　経路積分を定義することができる汎関数の類は驚くべきほどにいろいろある．これまで式（2-15）で与えられるような汎関数を考えてきた．ここで全く

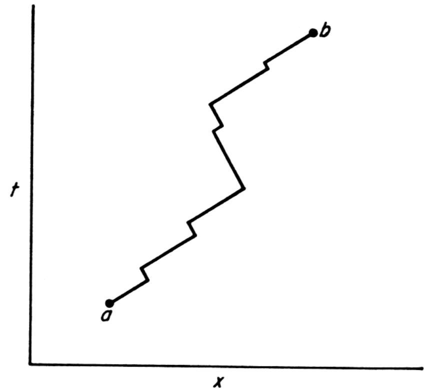


図2-4　2次元平面を運動する相対論的粒子の経路は直線線分からなるジグザグ運動である．線分の傾きの絶対値は一定で，交互に符号を変える．ある特定の経路の振幅すなわち a から b に到る核は，その経路に沿っての角の数 R に依存する．式 (2-26)，(2-27) を見よ．

異なるタイプを考えよう．このタイプの汎関数は1次元の相対論的運動の問題に現れる．1次元的に運動する粒子が光速で前後にのみ動けるものとする．便宜上，光速，粒子の質量，プランク定数が全部1となるように単位系をとる．そうすると図2-4に示すように xt 平面ですべての軌道は $\pm 45°$ の傾きで行きつ戻りつする．このような経路の振幅は次のようにして定義される．時間を等しい長さ ε の小さな区間に分割する．経路の方向転換はこれらの区間の端，すなわち時刻 $t=t_a+n\varepsilon$(n は整数) においてのみ起こるものとする．この相対論的問題について，このような経路に沿っての運動の振幅は式 (2-15) で定義される振幅と異なる．この場合の正しい定義は

$$\phi=(i\varepsilon)^R \tag{2-26}$$

である．ここで R は経路に沿っての方向転換の数，すなわち角(かど)の数である．

問題として，読者はこの定義を用いて，1つの角をもつ経路，2つの角をもつ経路などの寄与の和をとることにより振幅 $K(b,\ a)$ を計算することができるであろう．このようにして

$$K(b, a)=\sum_R N(R)(i\varepsilon)^R \tag{2-27}$$

を求めよ．ここで $N(R)$ は R 個の角をもつ経路の数である．4個の別々の K を計算するのがよい．すなわち，点 a から正の速度で出発し点 b に正の速度で到達する振幅 $K_{++}(b,a)$，点 a から負の速度で出発し点 b に正の速度で到達する振幅 $K_{+-}(b,a)$ などである．K_{-+}，K_{--} も同様に定義される．

次に時間の単位を $\hbar/mc^2$ で定義する．時間間隔が非常に長く（$t_b-t_a\gg\hbar/mc^2$）平均速度が小さい［$x_b-x_a\ll c(t_b-t_a)$］場合に，振幅が因子 $\exp[(imc^2/\hbar)(t_b-t_a)]$ を除いて近似的に自由粒子の振幅［式（3-3）］と同じであることを示せ．ここで与えられている振幅の定義とその表式は，1次元の運動をする自由粒子の相対論的量子力学において正しい．結果はこの場合 Dirac 方程式と等価である．

2-5　続いて起こる事象

2つの事象に対する規則　この節では，時間的に続いて起こる事象の振幅を構成するための重要な法則を導く．t_a と t_b の間のある時刻を t_c とする．a と b の間の任意の経路に沿っての作用を

$$S[b,a]=S[b,c]+S[c,a] \tag{2-28}$$

と書くことができる．これは作用が時間積分で定義されることと L が速度より高次の時間微分によらないことから導かれる（L が高次の時間微分による場合，点 c における速度の値と場合によっては高次の微分とを特定しなければならなくなる）．式（2-25）を用いると

$$K(b,a)=\int\mathcal{D}x(t)\ e^{(i/\hbar)S[b,c]+(i/\hbar)S[c,a]} \tag{2-29}$$

と書くことができる．

どの経路も2つの部分に分割することができる．図2-5に示すように，第一の部分の端点は x_a と $x_c=x(t_c)$ であり，第二の部分の端点は x_c と x_b である．初めに a から c に到るすべての経路について積分し，次に c から b に到るすべての経路について積分し，最後にその結果を x_c のすべての可能な値について積分するという手順が可能である．この積分の第一段階を行うとき，$S[b,c]$ は定数とみなす．したがって結果を次のように書くことができる．

$$K(b,a)=\int_{x_c}dx_c\int_b^c\mathcal{D}x(t)\ e^{(i/\hbar)S[b,c]}K(c,a) \tag{2-30}$$

ここで積分は c と b の間の経路についてだけでなく端点 x_c についても行われなければならない．すなわち，この段階で，まず，ある任意の点 x_c と点 b の間のすべ

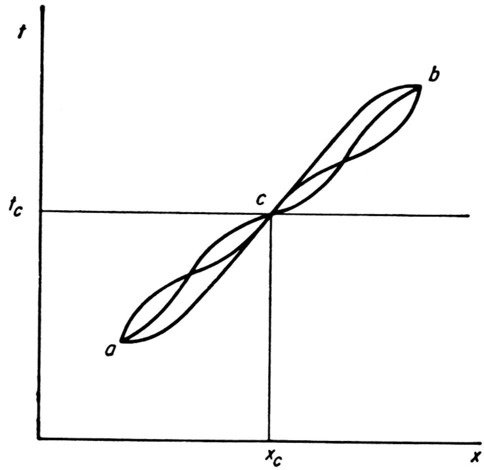


図2-5 すべての経路についての和をとる方法の1つとして，まず時刻 t_c において x_c を通る経路についての和をとり，その後で x_c について和をとる．c を経由して a から b に到る経路の振幅は以下の2つの因子の積である．(1) a から c に到る振幅，(2) c から b に到る振幅．これは，c を通るすべての経路についての和を与える．すなわち，c を経由して a から b に到る全振幅は $K(b, c)K(c, a)$ である．よって選択肢 (x_c の値) についての和をとると，a から b に到る全振幅に対して (2-31) が得られる．

ての経路について積分を行う．その結果残っているのは x_c のすべての可能な値についての積分である．したがって

$$K(b, a)=\int dx_c\, K(b, c)K(c, a) \tag{2-31}$$

式 (2-22) から出発すると議論はもっとはっきりするかも知れない．離散化した時刻の1つを t_c とする．すなわち $t_c=t_k$ および $x_c=x_k$ とする．初めに $i<k$ を満たすすべての x_i について積分を行う．これから因子 $K(c, a)$ が得られる．次に $i>k$ を満たすすべての x_i について積分を行う．これより因子 $K(b, c)$ が導かれる．残るのは x_c についての積分である．結果は式 (2-31) のように表される．

以上の結果は次のように要約できる．a から b に到る経路の選択肢は時刻 t_c に通過する位置 x_c を指定することにより分類される．a から b に到る粒子の振幅は次の規則によって計算できる．

1．a から b に到る粒子の振幅は，a から c に到りそれから b に到る振幅を x_c

のすべての可能な値について足しあわせたものである．

2．a から c に到りそして b に到る振幅は，a から c に到る振幅と c から b に到る振幅との積である．

よって次の規則が得られる．**時間的に続いて起こる事象全体の振幅はそれぞれの事象の積である．**

多数の事象への拡張　この重要な規則について多くの応用例がある．この後の章でそのいくつかの例を述べる．ここでこの規則を応用して振幅に対する方程式(2-22)を導いてみよう．

すべての経路を2ヵ所で分割することが完全に可能である．それぞれを時刻 t_c, t_d とする．このとき a から b に到る粒子の振幅を

$$K(b,a)=\iint dx_c\,dx_d\,K(b,c)K(c,d)K(d,a) \tag{2-32}$$

と書くことができる．これは，a から b に行く粒子を，まず a から d に行きそして d から c に行き最後に c から b に行く粒子とみなすことを意味する．このような経路をたどる振幅は，それぞれの部分の経路に対する振幅の積である．この積を x_c と x_d のすべての可能な値について積分することにより，a から b に行くすべての経路についての振幅が得られる．

この操作をくりかえして，時間を N 個の区間に分けると，

$$K(b,a)=\iint\cdots\int dx_1\,dx_2\cdots dx_{N-1}\,K(b,N-1)K(N-1,N-2)\cdots K(i+1,i)\cdots K(1,a) \tag{2-33}$$

が得られる．このことから式 (2-22) で与えられているのとは異なる方法で振幅を定義できることがわかる．この定義において，無限小の時間間隔 ε だけ離れている2点の間を動く粒子に対する振幅は

$$K(i+1,i)=\frac{1}{A}\exp\left[\frac{i\varepsilon}{\hbar}L\left(\frac{x_{i+1}-x_i}{\varepsilon},\frac{x_{i+1}+x_i}{2},\frac{t_{i+1}+t_i}{2}\right)\right] \tag{2-34}$$

である．これは ε の1次まで正しい．時間的に続いて起こる事象の振幅の積をとるという規則により，全経路に対する振幅に対して

$$\phi[x(t)]=\lim_{\varepsilon\to 0}\prod_{i=0}^{N-1}K(i+1,i) \tag{2-35}$$

が得られる．異なる経路についての振幅は相加的であるという規則を用いると，$K(b,a)$ の定義が得られる．実際には結果の表式は式(2-22)と同じである．

2-6 注 意

電子の相対論においては，ある経路の振幅を $e^{iS/\hbar}$ という形や別の簡単な形に表すことができない．しかしながら，振幅を組みあわせる規則は有効である（少し変更を加えるだけで）．軌道の振幅は存在する．実際，式(2-35)で与えられる．唯一の相違点は，相対論の場合 $K(i+1, i)$ が式(2-34)のように簡単に表されないということである．スピンを考慮に入れる必要性と電子・陽電子の対生成の可能性によって表式が複雑になる．

もっと多くの変数からなる非相対論的系において，さらに電磁場の量子論においても，振幅を組みあわせる規則が成り立つだけでなく，振幅そのものがこの章で述べた規則に従うのである．すなわち，ある変数のそれぞれの運動に対して，その作用を $\hbar$ で割ったものを位相とする振幅が存在する．

後の章でこれらの複雑な例を扱う．

第3章　特別な例によって概念を展開する

この章ではある特別なタイプの運動を支配する振幅について述べる．数学的結果の物理的意味を調べることにより，量子力学的法則のもとにある運動について直観的物理描像を探索する．波動関数を導入しそれと振幅との関係を述べる．これは本書の方法を伝統的な量子力学の方法と関係付けるための第一歩である．

また本章では，すべての経路についての和を計算するための特別な数学的方法を導入する．第2章ですべての経路についての和の考えを特殊な計算方法を用いて導入した．その方法は概念をはっきりさせたかも知れないが，それを具体的に使おうとすると厄介な道具立てである．本章で導入するもっと簡単な方法は後の計算に非常に有効である．

したがって本章は3つの目的をもつ．量子力学の原理についてわれわれの理解を深めること，われわれの方法と他の方法との関係をつけること，有用な数学的方法をいくつか導入することである．

3-1　自由粒子

経路積分　すべての経路についての和を記述するために第2章で用いた方法を使って自由粒子の振幅を計算してみよう．自由粒子のラグランジアンは

$$L=m\frac{\dot{x}^2}{2} \tag{3-1}$$

である．したがって式（2-21）－（2-23）より，自由粒子の振幅は

$$K(b,a)=\lim_{\varepsilon\to 0}\iint\cdots\int dx_1\cdots dx_{N-1}\exp\left[\frac{im}{2\hbar\varepsilon}\sum_{j=1}^{N}(x_j-x_{j-1})^2\right]\left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{-N/2} \tag{3-2}$$

となる．これはガウス積分，すなわち $\int\exp(-ax^2)\,dx$ や $\int\exp(-ax^2+bx)\,dx$ の形の積分になっている．ガウス関数の積分はまたガウス関数であるから，積分を次々に行うことができる．結果は

$$K(b,a)=\left[\frac{2\pi i\hbar(t_b-t_a)}{m}\right]^{-1/2}\exp\left[\frac{im(x_b-x_a)^2}{2\hbar(t_b-t_a)}\right] \tag{3-3}$$

である．

計算を次のように行う．初めに

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx_1\left(\frac{2\pi i\hbar\cdot\varepsilon}{m}\right)^{-1}\exp\left\{\frac{im}{2\hbar\varepsilon}[(x_2-x_1)^2+(x_1-x_0)^2]\right\}$$
$$=\left(\frac{2\pi i\hbar\cdot 2\varepsilon}{m}\right)^{-1/2}\exp\left[\frac{im}{2\hbar(2\varepsilon)}(x_2-x_0)^2\right] \tag{3-4}$$

に注意する．次にこれに

$$\left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{-1/2}\exp\left[\frac{im}{2\hbar\varepsilon}(x_3-x_2)^2\right] \tag{3-5}$$

を掛けて x_2 について積分する．結果は式(3-4)と同様であるが，$(x_2-x_0)^2$ は $(x_3-x_0)^2$ となり 2 ヵ所で 2ε は 3ε となる．こうして

$$\left(\frac{2\pi i\hbar\cdot 3\varepsilon}{m}\right)^{-1/2}\exp\left[\frac{im}{2\hbar\cdot 3\varepsilon}(x_3-x_0)^2\right]$$

が得られる．このようにして漸化操作が確定する．これを $n-1$ 回行うと

$$\left(\frac{2\pi i\hbar n\varepsilon}{m}\right)^{-1/2}\exp\left[\frac{im}{2\hbar\cdot n\varepsilon}(x_n-x_0)^2\right]$$

が得られる．$n\varepsilon=t_n-t_0$ であるから $N-1$ 回くりかえしたあとの結果が式 (3-3) と等しくなることは容易にわかる．

別の方法もある．式 (3-4) を使ってすべての奇数 i の（N が偶数であると仮定して）x_i について積分することができる．その結果は形式的に式 (3-2) と似ているが積分変数の数は半分である．残りの変数は 2ε ずつ離れた時刻で定義されているものである．したがって少なくとも N が 2^k という形をしている場合には，式 (3-3) はこのような積分を k 回くりかえして得られる．

問題 3 - 1　粒子が点 b に到達する確率は定義より振幅 $K(b,a)$ の絶対値の 2 乗に比例する．式 (3-3) の自由粒子の振幅に対してこれは

$$P(b)dx=\frac{m}{2\pi\hbar(t_b-t_a)}dx \tag{3-6}$$

となる．

この確率は x の全領域で積分すると発散するから，相対的確率を表す．この特殊な規格化条件は何を意味するのか．これは，粒子があらゆる値の運動量を等確率で

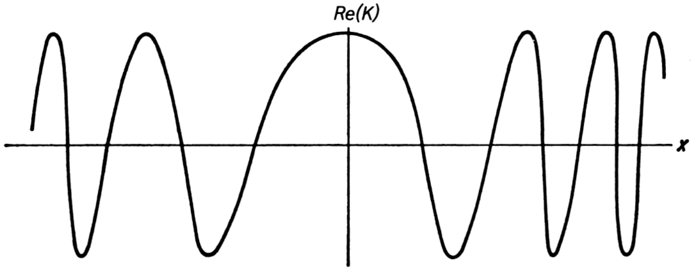


図3-1　原点から出発して時刻 t 後にいろいろな距離 x に到る振幅の実数部分．虚数部分は示されていないが，90° だけ位相のずれた類似の波である．よって振幅の絶対値は一定である．x の大きいところでは波長は短い．すなわち，古典粒子が x の大きいところに到達できるのは，高速で運動する場合だけである．一般的に，波長と古典的運動量とは逆比例の関係にある［(3-10) を見よ］．

もって点 a から出発するという古典的描像に対応することを示せ．粒子の運動量が領域 dp にある相対的確率は $dp/2\pi\hbar$ であることを示せ．

運動量とエネルギー　自由粒子の振幅の意味を調べる．便宜上 a を時間と空間の原点にとる．他のある点 $b=(x, t)$ に行く振幅は

$$K(x, t\,;\,0, 0)=\left(\frac{2\pi i\hbar t}{m}\right)^{-1/2}\exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) \tag{3-7}$$

である．時間を固定すると，振幅は距離の関数として図3-1に示すように変化する．ここで式 (3-7) の実数部が描かれている．

原点から遠ざかれば遠ざかるほど振動が激しくなる．x が大きくて多くの振動が起こるところでは，隣り合う節の間の距離は少なくともいくつかの振動の間ほぼ一定となる．すなわち，振幅は波数がゆっくり変化する正弦波のように振る舞う．この波長 λ を評価することは興味あることである．x を λ だけ変えたら振幅の位相は 2πだけ増えなければならない．すなわち

$$2\pi=\frac{m(x+\lambda)^2}{2\hbar t}-\frac{mx^2}{2\hbar t}=\frac{mx\lambda}{\hbar t}+\frac{m\lambda^2}{2\hbar t} \tag{3-8}$$

である．λ^2 を $x\lambda$ に対して無視する（すなわち，$x\gg\lambda$ と仮定する）と，

$$\lambda=\frac{2\pi\hbar}{m(x/t)} \tag{3-9}$$

が得られる．

古典力学の観点から見ると，時間 t の間に原点から x まで運動する粒子は速度 x/t と運動量 mx/t をもつ．量子力学の観点から見ると，粒子が古典的運動量 $p=mx/t$ をもつという記述が適切である場合に，振幅は波長

$$\lambda=\frac{h}{p} \tag{3-10}$$

で空間的に変化する．

この関係をもっと一般的に示すことができる．磁気分析器のような大きな装置によって，ある与えられた運動量 p の粒子を与えられた点にもってくるものとする．装置が十分大きくて古典物理学がよい近似を与えるときには，決められた点に到達する粒子の振幅は，h/p に等しい波長で空間的に激しく変化することを後で示す．前に見たとおり，そのような古典近似において，量子力学的振幅は

$$K\sim\exp\left[\frac{i}{\hbar}S_{\mathrm{cl}}(b, a)\right] \tag{3-11}$$

となる．

終点 x_b の位置を変化させると，古典的作用も変化する．この作用が $\hbar$ と較べて大きいとき(半古典近似)，核 K は x_b の変化に対して非常に激しく振動する．終点が単位長さだけ変位するとき，位相の変化は

$$k=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial S_{\mathrm{cl}}}{\partial x_b} \tag{3-12}$$

である．一方，$\partial S_{\mathrm{cl}}/\partial x_b$ は粒子が点 x_b に到着するときの古典的運動量である(問題2-4を見よ)．したがって $p=\hbar k$ である．単位長さ当たりの波の位相変化を表す量 k は波数と呼ばれ，非常に有用である．波長は位相が 2π だけ変化する距離であるから，$k=2\pi/\lambda$ である．式 (3-12) は運動量を波の波数と結び付ける De Broglie の公式 $p=\hbar k$ である．

次に式 (3-7) で与えられる自由粒子の振幅の時間依存性を調べよう．距離を固定して時刻を変えるとする．核の実数部の変化は図3-2に示されている．振動数も振幅も t とともに変化する．

t は非常に大きいものとし，t の変化に対して核 K の振幅の変化は無視する．振動の周期 T は位相が 2π だけ増えるのに必要な時間として定義される．したがって

$$2\pi=\frac{mx^2}{2\hbar t}-\frac{mx^2}{2\hbar(t+T)}=\frac{mx^2}{2\hbar t^2}\left(\frac{T}{1+T/t}\right) \tag{3-13}$$

角振動数 $\omega=2\pi/T$ を導入し，$t\gg T$ と仮定すると上の式は

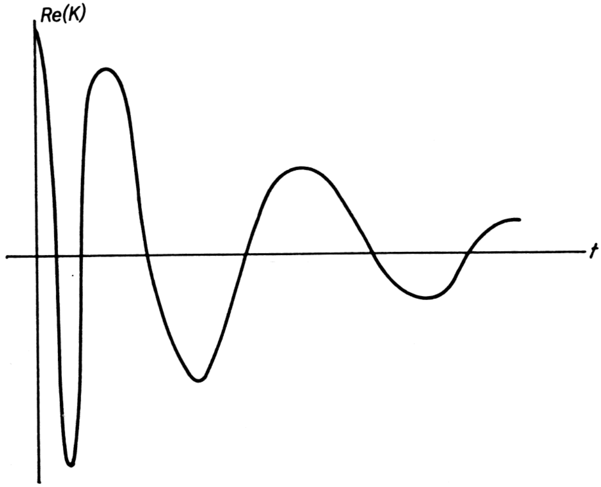


図3-2　粒子をある与えられた位置に見出す振幅は時間とともに変化する．その実数部分を図示する．振動数は，古典粒子が時間 t の間にその位置に到達するためにもっていなければならないエネルギーに比例する．

$$\omega \simeq \frac{m}{2\hbar}\left(\frac{x}{t}\right)^2 \tag{3-14}$$

と書ける．$m(x/t)^2/2$ は自由粒子の古典的エネルギーであるから，この式は

$$\text{エネルギー} = \hbar\omega \tag{3-15}$$

ということを意味している．

運動量と波長を結び付ける関係式（3-10）のように，上の関係式（3-15）も古典物理学で適切に記述される装置に対して必ず成り立つ．前の関係式のように，これももっと一般的な議論から導かれる．

式（3-11）によると，終点の時刻 t_b の変化によって核は急激に振動する．その振動数は

$$\omega = -\frac{1}{\hbar}\frac{\partial S_{\mathrm{cl}}}{\partial t_b} \tag{3-16}$$

である．$-\partial S_{\mathrm{cl}}/\partial t_b$ は古典的にはエネルギー E として解釈される（問題2-5を見よ）．したがって

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \tag{3-17}$$

このようにして運動量とエネルギーの概念は次のような規則によって量子力学に拡張される.

1. 振幅が e^{ikx} のように変化するならば，粒子は運動量 $\hbar k$ をもつという.

2. 振幅が一定の振動数をもち，$e^{-i\omega t}$ のように時間変化するならば，エネルギーは $\hbar\omega$ であるという.

前に見たように，この規則は古典的極限でエネルギーと運動量の定義と一致する.

問題 3-2 t_b が t_a よりも大きいとき，代入することにより自由粒子の核が微分方程式

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial K(b,a)}{\partial t_b}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 K(b,a)}{\partial x_b^2} \tag{3-18}$$

を満たすことを示せ.

3-2 スリットを通した回折

概念的実験 別のもっと複雑な例を考察することにより，量子力学の物理的解釈と古典力学との関係についてさらに理解を深めることができる. $t=0$ で粒子が原点から出発し，ある時間間隔 T の後，ある点 x_0 に存在することが観測されたとする. 古典的には，粒子は速度 $v_0=x_0/T$ をもっていたということになる. もし粒子がそのまま次の時間間隔 τ においても運動を続けるならば，さらに距離 $v_0\tau$ だけ進むことになる. これを量子力学的に解析するために，次のような問題を解いてみよう.

$t=0$ で粒子は原点 $x=0$ から出発する. 時間 T 後に粒子が x_0 から距離 $\pm b$ 以内に存在することがわかっているものとする. 次の時間 τ の後に，x_0 から x だけ離れたところに粒子を見出す確率はいくらか. 時刻 $T+\tau$ において位置 x に到達する振幅は，原点から終点に到るそれぞれの軌道の寄与の和であると考えられる. ここでそれぞれの軌道は時刻 T において x_0 から距離 $\pm b$ 以内を通るものとする.

この計算に入る前に，今どのような実験を考えているかについて述べておこう. 粒子が x_0 から距離 $\pm b$ 以内を通るということをどのようにして知ることができるであろうか. 1つの方法は粒子の観測を時刻 T において行い，粒子が区間 $\pm b$ 内にあるかどうかを見ることである. これはもっとも自然なやり方であるが，他の実験方法と較べると詳細な解析を行うのがむずかしい. なぜなら電子と観測装置との間の相互作用が複雑であるからである.

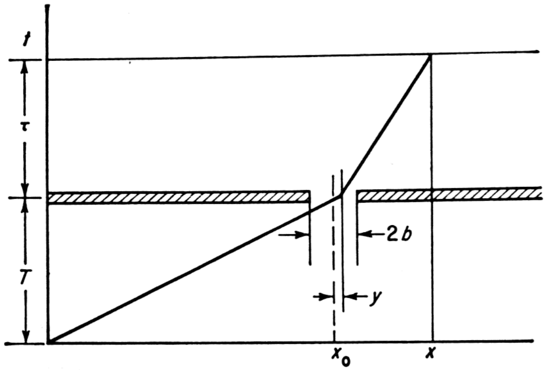


図3-3　時刻 $t=0$ において $x=0$ から出発する粒子が，時刻 $t=T$ において x_0-b と x_0+b の間を通過するものとする．τ 秒後(すなわち $t=T+\tau$)に位置 x にその粒子を見出す確率を計算しよう．古典的法則によれば，粒子は $x_0(\tau/T)+b(1+\tau/T)$ と $x_0(\tau/T)-b(1+\tau/T)$ の間に存在しなければならない．すなわち，時刻 T におけるスリットをそのまま直線で引きのばした範囲になければならないことになる．しかしながら，量子力学の法則によって，そのような粒子がこれらの古典的極限の範囲の外に現れる確率が 0 でないことが示される．

この問題をあつかうのに，自由粒子の運動法則をそのまま適用することはできない．なぜなら，粒子の運動はスリットによって束縛されているからである．よって，自由粒子の運動が 2 つ続いて起こるものと考える．初めの運動によって粒子は $x=0$，$t=0$ から $x=x_0+y$，$t=T$ に到る．ここで $|y|\leq b$ とする．次の運動で粒子は $x=x_0+y$，$t=T$ から x，$t=T+\tau$ に到る．全体の振幅は，この 2 つの自由粒子の核の積を y について積分したもので，(3-19)のようになる．

たとえば時刻 T において非常に強い光を用いて，点 x_0 から $\pm b$ の範囲の外にある x 軸上のすべての点を見ることにする．もし粒子を見つけたら，実験を中断する．$\pm b$ を除く領域を徹底的に調べても粒子が見出せない場合のみを考える．すなわち x_0 から $\pm b$ 以内の領域の外側を通る軌道はすべて除外する．実験の状況は図3-3に描かれている．したがって振幅は

$$\psi(x)=\int_{-b}^{b}dy\ K(x+x_0,\ T+\tau\ ;\ x_0+y,\ T)K(x_0+y,\ T\ ;\ 0,0) \tag{3-19}$$

と書かれる．

この表式は，時間的に続いて起こる事象を組みあわせる規則に従っている．第一の事象は粒子が原点からスリットに行くことである．第二の事象は粒子がスリットから点 x にさらに進むことである．スリットは有限の幅をもつ．よって，全行程を

進む方法はそれぞれ，スリットの中の1つの微小区間によって表される．したがってスリットの幅について積分しなければならない．スリットを外れる粒子は補捉され実験から取り除かれる．そのような粒子の振幅は算入されない．スリットを通過する粒子は自由粒子として運動し，その振幅は式 (3-3) で与えられる．したがって振幅は

$$\psi(x)=\int_{-b}^{b}dy\left(\frac{2\pi i\hbar\tau}{m}\right)^{-1/2}\exp\left[\frac{im(x-y)^2}{2\hbar\tau}\right]\left(\frac{2\pi i\hbar T}{m}\right)^{-1/2}\exp\left[\frac{im(x_0+y)^2}{2\hbar T}\right] \quad (3\text{-}20)$$

となる．

この積分は Fresnel 積分で表される．この式はわれわれが求めている物理的結果を含んでいるが，Fresnel 積分が数学的に複雑であるため不明瞭である．数学的複雑さによって物理的結果を混乱させるよりも，別の類似の表式を用いて数学的にもっと簡単な形にする．

ガウス型スリット　積分因子として関数 $G(y)$ を導入し，$y=-b$ と $y=b$ との間の区間で1であり，それ以外で0であるとする．このとき結果を変えることなく (3-20) の積分の上限下限を無限大まで延ばすことができる．

$$\psi(x)=\int_{-\infty}^{\infty}dy\frac{mG(y)}{2\pi i\hbar\sqrt{\tau T}}\exp\left\{\frac{im}{2\hbar}\left[\frac{(x-y)^2}{\tau}+\frac{(x_0+y)^2}{T}\right]\right\} \quad (3\text{-}21)$$

ここで

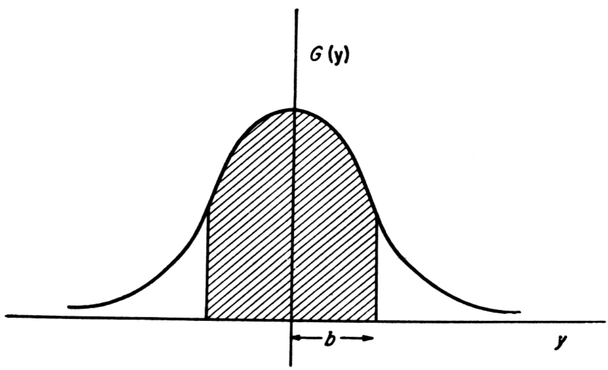


図3-4　ガウス型関数 $G(y)=e^{-y^2/2b^2}$ の形．この曲線は，標準偏差 b の正規分布と同じ形である．

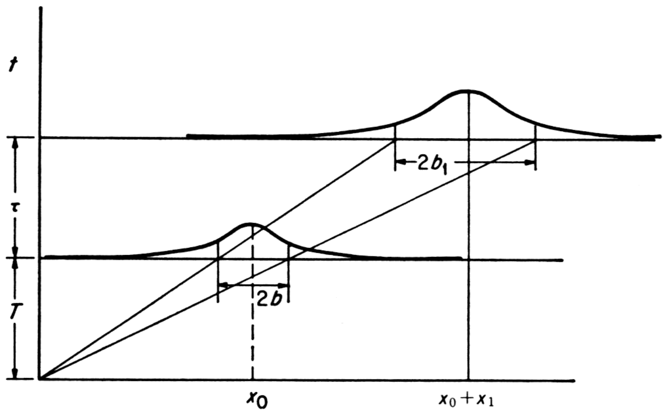


図3-5　ガウス型スリットを通過する粒子の経路．粒子が古典的運動法則に従うならば，時刻 $T+\tau$ における粒子の分布は時刻 T における分布と同様な形になるはずである．相違点としては，飛行時間に比例して分布が拡がるということだけである．つまり分布の特徴的な幅は $2b$ から $2b_1$ に増加する．ここで $b_1=b(T+\tau)/T$．しかし，量子力学的運動に対しては，実際の拡がりはこの古典的拡がりよりも大きい．

$$G(y)=\begin{cases}1 & -b\leqq y\leqq b\\ 0 & |y|>b\end{cases}$$

この関数形の代わりに，ガウス関数を用いる．

$$G(y)=e^{-y^2/2b^2} \tag{3-22}$$

この関数は図3-4に示したような形をしている．このような曲線の**有効幅**はパラメータ b と関係がある．この特別な関数の場合，この曲線の下の面積の約 2/3 が $-b$ と b の間にある．

このようなガウス型スリットを与える想像上の実験において，金属部分をどのように設計すべきかわからない．しかし，考え方の上での困難はない．時刻 T において関数 $G(y)$ に比例する相対的振幅で粒子が x 軸上に分布している（相対的確率は $[G(y)]^2$ に比例する）という状況である．粒子が古典的に運動するならば，時間間隔 τ の後に x 軸上に類似の分布を見出すことが期待される．その分布は図3-5に示すように中心は x_1 だけ x_0 の右にあり幅 b_1 も拡がっている．ここで

$$x_1=\left(\frac{x_0}{T}\right)\tau,\quad b_1=b\left(1+\frac{\tau}{T}\right) \tag{3-23}$$

このようなガウス型スリットの場合，振幅に対する式は

$$\psi(x)=\int_{-\infty}^{\infty}dy\,\frac{m}{2\pi i\hbar\sqrt{\tau T}}\exp\left[\frac{im}{2\hbar}\left(\frac{x^2}{\tau}+\frac{x_0^2}{T}\right)\right.$$
$$\left.+\frac{im}{\hbar}\left(-\frac{x}{\tau}+\frac{x_0}{T}\right)y+\left(\frac{im}{2\hbar\tau}+\frac{im}{2\hbar T}-\frac{1}{2b^2}\right)y^2\right] \tag{3-24}$$

である．この積分は，$\mathrm{Re}\,(\alpha)<0$ として

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx\,\exp(\alpha x^2+\beta x)=\sqrt{\frac{\pi}{-\alpha}}\exp\left(-\frac{\beta^2}{4\alpha}\right) \tag{3-25}$$

という形であり，指数部分を完全平方式にすることにより実行できる．したがって振幅は

$$\psi(x)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar}}\left[T\tau\left(\frac{1}{T}+\frac{1}{\tau}+\frac{i\hbar}{b^2m}\right)\right]^{-1/2}$$
$$\times\exp\left[\frac{im}{2\hbar}\left(\frac{x^2}{\tau}+\frac{x_0^2}{T}\right)-\frac{\left(\frac{im}{\hbar}\right)^2}{4\left(\frac{im}{2\hbar}\right)}\frac{\left(-\frac{x}{\tau}+\frac{x_0}{T}\right)^2}{\frac{1}{\tau}+\frac{1}{T}+\frac{i\hbar}{b^2m}}\right] \tag{3-26}$$

となる．

原点からスリットの中心に到る古典的速度は $v_0=x_0/T$ である．この表式を代入しいくつかの項をならべかえると，振幅は

$$\psi(x)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar}}\left(T+\tau+T\tau\frac{\hbar i}{mb^2}\right)^{-1/2}$$
$$\times\exp\left[\frac{im}{2\hbar}\left(v_0^2T+\frac{x^2}{\tau}\right)+\frac{\left(\frac{m^2}{2\hbar^2\tau^2}\right)(x-v_0\tau)^2}{\frac{m}{\hbar}\left(\frac{i}{T}+\frac{i}{\tau}\right)-\frac{1}{b^2}}\right] \tag{3-27}$$

となる．

初めに x 軸上の各点に粒子が到達する相対的確率を考えよう．この確率は振幅の絶対値の 2 乗に比例する．虚数を指数とする数の絶対値の 2 乗は 1 である．よって式 (3-27) の 2 番目の因数と最後の指数関数を $Ae^{i\alpha}$ [A，α は実数] という形に書きかえることにより，

$$P(x)dx=\frac{m}{2\pi\hbar T}\frac{b}{\Delta x}\exp\left[-\frac{(x-v_0\tau)^2}{(\Delta x)^2}\right]dx \tag{3-28}$$

が得られる．ここで

$$(\Delta x)^2=b^2\left(1+\frac{\tau}{T}\right)^2+\frac{\tau^2\hbar^2}{m^2b^2}=b_1^2+\frac{\tau^2\hbar^2}{m^2b^2} \tag{3-29}$$

とおいた.

予想どおり，分布は式(3-23)で与えられる点 $x_1=v_0\tau$ を中心とするガウス関数である．しかし，分布の拡がり Δx は予想される式 (3-23) の値 b_1 よりも大きい．このことは次のように解釈される．a_1 と a_2 は独立な確率変数であるとし，平均値のまわりの平均2乗偏差をそれぞれ α_1, α_2 とする．このとき $a_3=a_1+a_2$ の平均2乗偏差は $\alpha_3=(\alpha_1^2+\alpha_2^2)^{1/2}$ である．ある特定の分布の平均2乗偏差はその分布の拡がりあるいは幅の大きさを表す．実際ガウス分布 $e^{-x^2/2b^2}$ の平均2乗偏差は b である*)．

したがってこの量子力学的系は平均2乗偏差が

$$\Delta x_1=\frac{\hbar\tau}{mb} \tag{3-30}$$

であるような確率変数をもつ系として振る舞う．物理的意味をもつのは，見かけ上の変数 x_1 よりはむしろ偏差 Δx_1 である．この項が量子力学的性格をもつことは定数 $\hbar$ を含んでいることから明らかである．このような項は質量の小さい粒子や狭いスリットの場合に重要となる．

このように，量子力学によれば，小さい粒子が狭いスリットを通ると，将来の位置は不確定になる．この不確定性 Δx_1 はスリットを通る時刻と次の位置観測の時刻との間の時間 τ に比例する．古典的な速度の概念を導入すれば，スリットを通ることにより

$$\delta v=\frac{\hbar}{mb} \tag{3-31}$$

だけの速度の不確定さが生じたということもできる．スリットの幅 $2b$ は，スリットを通るときの粒子の位置の不確定性を表すものと考えることもできよう．この不確定性を δx と呼び，積 mv を運動量 p と書くと，式 (3-31) は

$$\delta p\delta x=2\hbar \tag{3-32}$$

となる．

ふたたび不確定性原理の表現が得られた．すなわち古典的に速度がわかっていても，幅 δx のスリットを通ることによって乱雑な運動量が発生したかのように，将来の位置の不確定性が増加するのである．古典的な概念を使ってこの量子力学の結果を定性的に述べると，位置を知ることが運動量の不確定性をつくり出すことになる．

式 (3-28) の指数の前にある因子はどうであろうか．この式を $-\infty$ から $+\infty$ ま

*)　x^2の平均値はb^2となるので，bを平均2乗偏差と呼ぶ．

での x の全領域について積分すると，その結果は

$$P(\text{任意の } x)=\frac{m}{2\pi\hbar T}b\sqrt{\pi} \tag{3-33}$$

となる．これは粒子がスリットを通り抜ける確率でなければならない．なぜなら積分の結果はスリットを通り抜ける粒子のみを含んでいるからである．しかしながらこの結果は別の方法でも得られる．核 $K(x_0+y, T; 0,0)$ の絶対値の 2 乗を考えよう．この核は式（3-20）の被積分関数の 2 番目の因子からなる．この核の絶対値の 2 乗は粒子がスリットの中の点 x_0+y に到達する確率分布関数である．すなわち

$$P(x_0+y)dy=\frac{m}{2\pi\hbar T}dy \tag{3-34}$$

この確率はスリット上の位置によらない．したがってこれにスリットの幅を掛けるとスリットに粒子が到達する全確率が得られることになる．これよりこのガウス型スリットの有効幅は $\sqrt{\pi}b$ であるということがわかる．縁が鋭いもとのスリットを使えば有効幅は $2b$ となる．

問題 3-3　式 (3-20) の振幅を 2 乗し x について積分することにより，もとのスリットを通り抜ける確率が

$$P(\text{通過})=\frac{m}{2\pi\hbar T}2b \tag{3-35}$$

であることを示せ．

この問題を解く際に

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx\,e^{iax} \tag{3-36}$$

という積分が現れる．これは Dirac のデルタ関数 $\delta(a)$ の積分表示である*)．

このように量子力学の結果から，スリットを粒子が通る確率は粒子がスリットに到達する確率と等しいと考えてよいことになる．

運動量とエネルギー　次に，運動量が確定している場合に振幅が e^{ikx} のように変化することを確かめよう．式（3-26）で与えられている振幅をふたたび詳しく調べる．今度はスリットを通過した後の粒子の速度ができるだけ正確にわかるように実験の

---

*）付録の積分表と，L.I. Schiff, *Quantum Mechanics, 2ed.* (McGraw-Hill Book Company, New York, 1955)，p. 50-52 を見よ．

条件を設定することにする．

量子力学的考察を別にしても，速度に b/T だけの古典的不確定性がある．与えられたスリットの幅に対して T を十分大きく選ぶことにより，この不確定性を無視できるほどに小さくすることができる．また x_0 も極端に大きくとることにより平均速度 $x_0/T=v_0$ が 0 にならないようにすることができる．v_0 と τ を定数とすると，T の大きい極限で振幅の表式は

$$\psi(x)\simeq\frac{\text{定数}}{\sqrt{1+\dfrac{\tau\hbar i}{mb^2}}}\exp\left[\frac{imx^2}{2\hbar\tau}+\frac{m^2(x-\tau v_0)^2}{2\hbar^2\tau^2\left(\dfrac{im}{\hbar\tau}-\dfrac{1}{b^2}\right)}\right] \tag{3-37}$$

となる．

次に運動量の量子力学的不確定性 $\hbar/b$ が非常に小さくなるようにする．すなわち b を非常に大きくして $1/b^2$ が無視できるようにする．このとき振幅は

$$\psi(x)\simeq\text{定数}\times\exp\left(\frac{imv_0}{\hbar}x-\frac{imv_0^2}{2\hbar}\tau\right) \tag{3-38}$$

のように書かれる．

これは重要な結果である．なぜなら，粒子の運動量が p であることがわかっているような状況を設定するならば，時刻 t に点 x に粒子が到達することの振幅は

$$\psi(x)\simeq\text{定数}\times\exp\left(\frac{i}{\hbar}px-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t\right) \tag{3-39}$$

となるからである．これは特定の波数 $k=p/\hbar$ の波動であることに注意する．さらにこの波動は特定の振動数 $\omega=p^2/2m\hbar$ をもつ．ちょうど古典力学と同じように運動量 p の自由粒子は特定の量子力学的エネルギー $p^2/2m$ をもつということになる．

任意の x に到達することの確率は振幅の2乗に比例し，この自由粒子の場合は x に依存しない．よって速度を正確に知ることは位置に関してなにも知らないことを意味する．正確に速度がわかっているような実験をしようとすると，位置を正確に予測する可能性を失ってしまう．われわれはすでに逆が正しい場合を見てきた．すなわち，スリットの幅 $2b$ に逆比例する量子力学的拡がりが存在することは，位置を完全に知ることによって速度の情報が排除されることを意味する．したがってどこにあるかを知っているならば，どれくらい速いのか知ることができない．どれくらい速いのかを知っているならば，どこにあるのかがわからない．このことが不確定性原理を表している．

3-3　縁の鋭いスリットについての結果

極限の場合の議論はこれくらいにして，スリットの幅と量子力学的拡がりとが同程度であり，また粒子が飛行する時間と距離が極端に大きくはない場合に戻る．ガウス型スリットの場合にガウス分布になることをすでに見た．もっと現実的な縁の鋭いスリットを考えて Fresnel 積分を実行すると，スリットを通過してから時間 τ 後の確率分布は図3-6に示すようになる．

この分布は

$$P(x)dx=\frac{m}{2\pi\hbar(\tau+T)}\left\{\frac{1}{2}[C(u_1)-C(u_2)]^2+\frac{1}{2}[S(u_1)-S(u_2)]^2\right\}dx \qquad (3\text{-}40)$$

と表される．ここで

$$u_1=\frac{x-\tau v_0-b(1+\tau/T)}{[(\pi\hbar\tau/m)(1+\tau/T)]^{1/2}},\quad u_2=\frac{x-\tau v_0+b(1+\tau/T)}{[(\pi\hbar\tau/m)(1+\tau/T)]^{1/2}} \qquad (3\text{-}41)$$

であり，$C(u)$ と $S(u)$ は Fresnel 積分の実数部と虚数部である．この確率分布の最初の因子は式 (3-6) で与えられている自由粒子の確率分布と同一である．残りの因子は実数と虚数の Fresnel 積分*) の組み合わせを含む．この因子によって図3-6の曲線で示したような変化が生じる．

したがって 2 つのスリットについて一般的な結果は同じである．粒子を見出す確率がもっとも大きいところはスリットを古典的に投影した領域である．この領域の外側には量子力学的拡がりがある．

この問題を扱う際に，2 つの別々の運動の組み合わせがあるかのように考えてきた．最初に粒子はスリットに行き次にスリットから観測点に行く．運動はスリットのところでほとんど不連続であるように見える．次のような疑問が生じるかも知れない．そのような不連続な運動をする粒子がどのようにして速度を「憶えていて」古典力学によって予言される方向に向かうのであろうか．換言すれば，スリットを狭くすることがどのようにして「記憶喪失」を引き起こし，ついには粒子があらゆる速度を同じ確率でもつに到るのであろうか．

これを理解するために，スリットに到達する振幅を調べてみよう．これは式(3-3)で与えられている自由粒子の振幅そのものである．ただし $x_a=t_a=0$，$x_b=x_0+y$，

---

*)　E. Jahnke and F. Emde, *Tables of Functions* (Dover Publication, Inc., New York, 1943)のP.34.

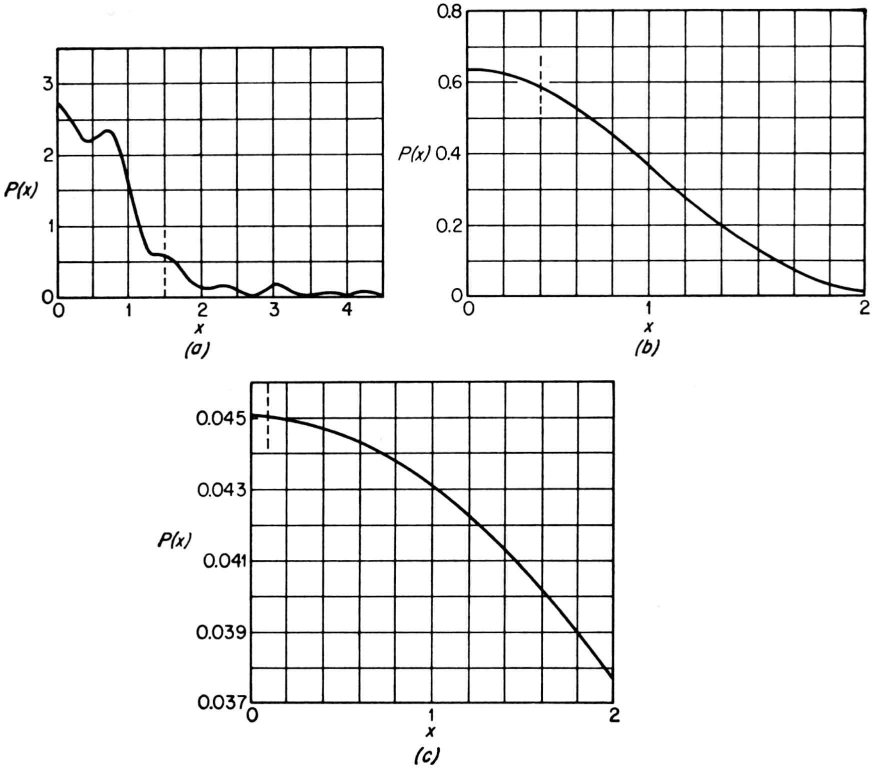


図3-6　3つの曲線は，いろいろな幅の，縁の鋭いスリットを通過してきた電子の分布を表す．それぞれの場合に，古典的に予言される幅 $b_1 = b(1+\tau/T)$ を垂直破線で表してある．古典的幅 b_1 と量子力学的拡がり $\varDelta x_1$ の比として3つの値を選んだ．曲線（a）では $b_1/\varDelta x_1 = 15$，曲線（b）では $b_1/\varDelta x_1 = 1$，曲線（c）では $b_1/\varDelta x_1 = 1/15$ である．それぞれの場合に，分布は古典的幅よりも拡がっている．分布の幅の2乗平均の平方根は近似的に $\varDelta x = [(\varDelta x_1)^2 + (b_1)^2]^{1/2}$ に比例する．

$t_b = T$ とおく．スリットを通るとき（y を変化させる），振幅の実数部も虚数部も正弦的に変化する．前に見たように，この変化の波長は運動量と関係している［式(3-10)を見よ］．この後の運動はこれらの波動による光学的な干渉の結果である．干渉は古典力学の予言する方向には一般的に相加的であり，その他の方向には相殺的である．

スリットを通る波動の波長が多様であれば（すなわちスリットの幅が非常に広ければ）干渉パターンは鋭く，運動は古典力学で近似できる．しかしスリットの幅を狭くして1つの波長さえも入れないものとすると，干渉を与える振動はなくなり，速度の情報は失われる．このようにしてスリットの幅が0となる極限で粒子はあらゆる速度をとりうることになるのである．

3-4 波動関数

これまで，粒子の運動を精密に追うことにより，時間空間の特定の点に粒子が到達する振幅を求めてきた．しかしながら，ある特定の場所に到達する振幅を考える際に，それ以前の運動を特に議論しないで行うこともしばしば有効である．その場合，$\psi(x,t)$ は，過去のある（おそらく不特定の）状況から (x,t) に到達する全振幅であるという．このような振幅もこれまで議論してきた振幅と同じ確率の性質をもっている．すなわち，時刻 t において点 x に粒子を見出す確率は $|\psi(x,t)|^2$ である．この種の振幅を波動関数と呼ぶ．これと今まで議論してきた振幅との相違は単に表記上の問題にすぎない．系が「状態」ψ にある，という言い方をすることがよくある．これは，系が波動関数 ψ によって記述される，ということの言い換えにすぎない．

したがって核 $K(x_2,t_2;x_1,t_1)=\psi(x_2,t_2)$ は実際に波動関数である．これは (x_2,t_2) に到る振幅である．特に記号 $K(x_2,t_2;x_1,t_1)$ は，粒子が (x_1,t_1) からきたという特別の場合の振幅であるという情報を与えてくれる．おそらくこの情報は問題によっては意味をもたず保持しておく必要がない．その場合は波動関数の記号 $\psi(x_2,t_2)$ を使う．

波動関数は振幅であるから，時間的に続いて起こる事象に対して振幅の組み合わせの規則を満たす．すなわち，式 (2-31) がすべての点 (x_1,t_1) に対して成り立つので，波動関数が積分方程式

$$\psi(x_2,t_2)=\int_{-\infty}^{\infty}dx_3\,K(x_2,t_2;x_3,t_3)\psi(x_3,t_3) \tag{3-42}$$

を満たすことがわかる．

この結果を物理的に述べることができる．(x_2,t_2) に到達する全振幅［すなわち $\psi(x_2,t_2)$］は，(x_3,t_3) に到達する全振幅 $\psi(x_3,t_3)$ と3から2に行く振幅［すなわち $K(x_2,t_2;x_3,t_3)$］を掛けたものを，x_3 のすべての可能な値について和あるいは積分を

行ったものである．これは粒子の過去の履歴が単独の関数によって表現されるということを意味する．粒子についてある特定の時刻における波動関数以外のことを全部忘れても，その時刻以後に粒子に起こることをすべて計算することができるのである．宇宙の将来に対するすべての歴史の効果は，単独の巨大な波動関数から計算されるのである．

問題3-4　自由粒子がある時刻 $t=0$ で確定した運動量をもっているとする（すなわち波動関数は $Ce^{ipx/\hbar}$ である）．式(3-3)，(3-42)を用いて，後の時刻においても粒子が同じ確定した運動量をもち（すなわち，波動関数は関数 $e^{ipx/\hbar}$ の形で x に依存する），時間的に $e^{(-ip^2/2m\hbar)t}$ という変化をすることを示せ．このことは粒子が確定したエネルギー $p^2/(2m)$ をもつことを意味する．

問題3-5　問題3-2の結果と式（3-42）を用いて，波動関数が方程式

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \tag{3-43}$$

を満たすことを示せ．これは自由粒子に対する Schrödinger 方程式である．

3-5　ガウス積分

この章の物理学の部分を終わって，数学的考察をこれから行う．経路についての和を計算する際に役に立ちそうな数学的技巧をいくつか導入する．

もっとも単純な経路積分は，すべての変数が指数部分に2次の多項式の形で現れる場合である．これをガウス積分と呼ぶ．量子力学では作用 S が経路 $x(t)$ を2次まで含んでいることに対応する．

経路積分の方法がこのような場合にどれだけ有効であるかを見るために，ラグランジアンが

$$L=a(t)\dot{x}^2+b(t)\dot{x}x+c(t)x^2+d(t)\dot{x}+e(t)x+f(t) \tag{3-44}$$

で与えられるような粒子の運動を考える．作用は固定した2つの端点の間で時間についてこのラグランジアンを積分したものである．実際，このラグランジアンの形は必要以上に一般的である．1次の項から部分積分により $\dot{x}$ を除くことができるが，このことは本章の目的にとって重要でない．われわれは，(x_a, t_a) から (x_b, t_b) に行くすべての経路についての積分

$$K(b,a)=\int_a^b \mathcal{D}x(t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}dt\,L(\dot{x},x,t)\right] \tag{3-45}$$

を決定したい．

もちろん，時間領域を短い時間要素に分割するという最初に述べた方法で，すべての経路についての積分を行うことが可能である．これが可能であるのは，被積分関数が変数 $\dot{x}$ と x についての 2 次形式の指数関数であるという事実による．このような積分は常に可能である．しかしわれわれはこの長い計算をしない．なぜなら，核のもっとも重要な特性は次のようにして決めることができるからである．

あらかじめ指定した端点の間の古典的軌道を $\bar{x}(t)$ とする．これは作用 S の極値を与える経路である．これまで用いてきた記号では

$$S_{\rm cl}[b,a]=S[\bar{x}(t)] \tag{3-46}$$

となる．

x を $\bar{x}$ と新しい変数 y を用いて表現することができる．

$$x=\bar{x}+y \tag{3-47}$$

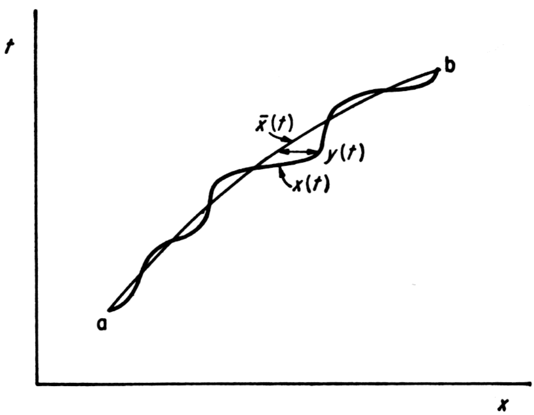


図3-7　古典的経路 $\bar{x}(t)$ と別の可能な経路 $x(t)$ との差は $y(t)$ である．2 つの経路はともに同じ端点に到達しなければならないので，$y(t_a)=y(t_b)=0$ である．それらの端点の間で $y(t)$ は任意の形をとりうる．古典的経路は完全に固定されているから，経路 $x(t)$ を任意に変えることは，差 $y(t)$ を変えることと等価である．よって，経路積分において経路の微分 $\mathcal{D}x(t)$ は $\mathcal{D}y(t)$ で置き換えられ，経路 $x(t)$ は $\bar{x}(t)+y(t)$ で置き換えられる．この形では，$\bar{x}(t)$ は経路に関する積分において定数である．さらに，新しい経路変数 $y(t)$ は両端点で値 0 をとるように制限を受けている．この置き換えによって経路積分は端点の位置によらないものとなる．

すなわち，経路上の点を座標原点からの距離 $x(t)$ によって定義する代わりに，図3-7に示すように古典的経路からのずれ $y(t)$ を測る．

それぞれの時刻で変数 x と y の差は $\bar{x}$ であり，これは積分の際に定数とみなせる．（もちろん，これはそれぞれの時刻 t で異なる値をとる．）したがって，明らかに時間を分割したときそれぞれの時刻 t_i において $dx_i = dy_i$ である．一般に $\mathcal{D}x(t) = \mathcal{D}y(t)$ である．

作用の積分は

$$S[x(t)] = S[\bar{x}(t) + y(t)] = \int_{t_a}^{t_b} dt[a(t)(\dot{\bar{x}}^2 + 2\dot{\bar{x}}\dot{y} + \dot{y}^2) + \cdots] \tag{3-48}$$

と書かれる．y を含まない項をすべて集めると，その結果の表式はまさに $S[\bar{x}(t)] = S_{\text{cl}}$ である．y について1次の項をすべて集めると，その結果の積分は0となる．これは実際に積分を行うことによって証明することができる（部分積分を含む）が，そのような計算をする必要はない．なぜならその結果が正しいことをすでに知っているからである．関数 $\bar{x}(t)$ はまさにこの要請によって決定されているからである．すなわち，$\bar{x}$ のまわりに経路の変分をとったときに，1次のオーダーで S が変化しないように $\bar{x}$ を選んであるからである．残っているのは y について2次の項である．それらは容易に取り出すことができ，

$$S[x(t)] = S_{\text{cl}}[b, a] + \int_{t_a}^{t_b} dt[a(t)\dot{y}^2 + b(t)\dot{y}y + c(t)y^2] \tag{3-49}$$

と書くことができる．

経路についての積分は古典的経路に依存しないので*），振幅は

$$K(b, a) = e^{(i/\hbar)S_{\text{cl}}[b,a]} \int_0^0 \mathcal{D}y(t) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} dt[a(t)\dot{y}^2 + b(t)\dot{y}y + c(t)y^2]\right\} \tag{3-50}$$

と表される．

すべての経路 $y(t)$ は $y=0$ から出て $y=0$ に戻るので，経路についての積分は両端点の時刻のみに依存する．したがって核は

$$K(b, a) = e^{(i/\hbar)S_{\text{cl}}[b,a]} F(t_b, t_a) \tag{3-51}$$

と表され，K は t_a と t_b の関数 $F(t_b, t_a)$ を除いて古典的軌道によって決定される．特に，空間変数 x_a，x_b に対する依存性は完全に求められる．1次の項の係数 $d(t)$，$e(t)$ および残りの係数 $f(t)$ に対する振幅の依存性も完全に求められることに注意

---

*）　これはラグランジアンが $x(t)$ の2次関数である場合に限る．

しよう.

これは経路積分を行うさまざまな方法に特徴的なことであるように思われる．多くの場合に一般的方法で求められるのであるが，相乗因子 F が完全に決定されないこともしばしばある．その場合は，解について知られている他の性質，たとえば，式(2-31) によって決める.

近似的表式 $K\sim e^{iS_{cl}/\hbar}$ は，S が2次式の場合に厳密であることに注目しよう.

問題 3-6　自由粒子のラグランジアンが2次式であることを用いて

$$K(b,a)=F(t_b,t_a)\exp\left[\frac{im(x_b-x_a)^2}{2\hbar(t_b-t_a)}\right] \tag{3-52}$$

と書けることを示し（問題2-1），F が時間差のみの関数 $F(t_b-t_a)$ であることを示せ.

問題 3-7　式 (2-31) に表されている性質から，F についてさらに詳しい情報が得られる．まず問題3-6の結果から $F(t_b-t_a)$ を $F(t)$ と書けることがわかる．ここで t は時間差 t_b-t_a である．この形を式 (3-52) の F に使って式 (2-31) に代入することにより，$F(t)$ と $F(s)$ を用いて $F(t+s)$ を表せ．ここで $t=t_b-t_c$，$s=t_c-t_a$ である．$F(t)$ を

$$F(t)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}f(t) \tag{3-53}$$

と表すとき，新しい関数 $f(t)$ は，

$$f(t+s)=f(t)f(s) \tag{3-54}$$

を満たすことを示せ．これは $f(t)$ が

$$f(t)=e^{at} \tag{3-55}$$

という形であることを意味する．ここで a は一般的に複素数である．すなわち $a=\alpha+i\beta$ である．われわれがこれまで示してきた原理から，$f(t)$ についての情報をこれ以上求めるのは困難である．しかしながら式 (2-21) で定義されている A を規格化定数としてとるならば，ε の1次で $f(\varepsilon)=1$ となる．これは式 (3-55) において $a=0$ とおくことに対応する．これから得られる $F(t)$ の値は式 (3-3) に一致する.

この例から明らかなように，被積分関数が複雑な関数であっても，経路積分の重要な性質が容易に得られる場合がある．被積分関数が経路変数を2次まで含む指数

関数であるかぎり，簡単な乗数因子を除いて完全な解が得られる．このことは変数の数がいくらであっても成り立つ．たとえば，

$$\int_a^b \mathcal{D}x(t)\int_c^d \mathcal{D}y(t)\cdots\int_k^l \mathcal{D}z(t)\exp\{E(x(t), y(t), \cdots, z(t))\} \tag{3-56}$$

という形の経路積分は重要な因子として $e^{E_{cl}}$ を含む．ここで E_{cl} は与えられた境界条件の下での E の極値である．そのための条件は，E が変数 x，y，……の 2 次関数であるということである．残りの因子は経路の端点の時刻の関数である．これから述べる経路積分のほとんどの場合，重要な情報は指数項に含まれていて残りの因子には含まれていない．実際ほとんどの場合，この残りの因子を評価する必要性はない．経路積分を解くためのこの方法は以下の章でしばしば用いられる．

3-6　ポテンシャル場の中の運動

1 つの簡単な応用は，作用 S がプランク定数 $\hbar$ と較べて非常に大きいという古典的極限の場合である．このような状況についてはすでに指摘したとおり，核 K は近似的に $\exp(iS_{cl}/\hbar)$ に比例する．ここで，この近似の数学的基礎を調べることができる．古典的経路 $\bar{x}$ のごく近くの経路のみが重要であるから $x=\bar{x}+y$ とおく．粒子がポテンシャル $V(x)$ の中を運動する場合，

$$V(x)=V(\bar{x}+y)=V(\bar{x})+yV'(\bar{x})+\frac{y^2}{2}V''(\bar{x})+\frac{y^3}{6}V'''(\bar{x})+\cdots \tag{3-57}$$

と書くことができる．ここでプライム記号は x についての微分を表し，すべての微分は古典的経路 $\bar{x}$ の上での値である．y の小さい値だけが重要であるから，V が十分滑らかな関数であり y^3 以上の高次のオーダーの項は無視できるものと仮定する．すなわち y^3V''' 以上の高次の項を無視できるものと仮定して低次の項のみを残す．

この仮定の下に被積分関数を y の 2 次式として表すことができる．実際 $\bar{x}$ が S の極値を与えるのだから，$S=S_{cl}+(y$ について 2 次の項$)$ となる．経路積分の重要な項は $\exp(iS_{cl}/\hbar)$ であり，S_{cl} はもちろん古典的経路上のポテンシャル $V(\bar{x})$ を含む．残りの y についての経路積分は 0 から 0 までであり，式 (3-50) の最後の因子の形をしている．これは $\exp(iS_{cl}/\hbar)$ に乗じる因子として滑らかな関数である．

以上の結果は古典的極限でなくても正しい場合がある．たとえば，V が x の 2 次関数であると仮定する．このとき解は厳密である．なぜなら式 (3-57) のような V の展開式に 2 次より高次のべきが現れないからである．このタイプの例は以下の問題に与えられている．別の例として，V がゆっくり変化する関数である場合を考え

る．特に，3次以上の導関数が極端に小さい場合，上に得られた結果は非常によい近似である．この特別な場合は，量子力学で WKB 近似と呼ばれている．

この近似がよい場合が他にもある．運動全体の時間間隔が非常に短いとする．粒子が古典的経路から大きく離れた経路を運動するとき，与えられた時間間隔の間に初期位置から出て終位置に戻るためには余分の大きな速度をもつことが必要である．これによる余分の運動エネルギーはその大きな速度の2乗に比例し，作用はこの運動エネルギーに時間間隔を掛けたもの（すなわち速度の2乗に時間間隔を掛けたもの）に大体比例する項を含む．このような経路の作用は非常に大きいので振幅の位相は近接する経路に対して大きく変化する．この場合にも V の展開において高次の項を落として構わない．

問題 3-8　調和振動子のラグランジアンは

$$L=\frac{m}{2}\dot{x}^2-\frac{m\omega^2}{2}x^2 \tag{3-58}$$

である．核が

$$K=F(t)\exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\sin\omega T}[(x_a^2+x_b^2)\cos\omega T-2x_ax_b]\right\} \tag{3-59}$$

であることを示せ（問題2-2を見よ）．ここで $T=t_b-t_a$ である．関数 $F(T)$ を具体的に計算していないことに注意．この関数は別の方法で得られ，調和振動子については

$$F(T)=\left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega T}\right)^{1/2} \tag{3-60}$$

となる（3-11節を参照）．

問題 3-9　一定外場の中の粒子のラグランジアンが

$$L=\frac{m}{2}\dot{x}^2+fx \tag{3-61}$$

であるとき核を求めよ．

結果は

$$K=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{1/2}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{m(x_b-x_a)^2}{2T}+\frac{1}{2}fT(x_a+x_b)-\frac{f^2T^3}{24m}\right]\right\} \tag{3-62}$$

である．ここで $T=t_b-t_a$ である．

問題 3-10　z 方向を向いている一定外部磁場 B の中にある粒子（電荷 e 質量 m）

のラグランジアンは

$$L=\frac{m}{2}(\dot{x}^2+\dot{y}^2+\dot{z}^2)+\frac{eB}{2c}(x\dot{y}-y\dot{x}) \tag{3-63}$$

である．これに対する核が

$$K=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{3/2}\left(\frac{\omega T/2}{\sin\omega T/2}\right)\exp\left[\frac{im}{2\hbar}\left\{\frac{(z_b-z_a)^2}{T}\right.\right.$$
$$\left.\left.+\frac{\omega}{2}\cot\left(\frac{\omega T}{2}\right)[(x_b-x_a)^2+(y_b-y_a)^2]+\omega(x_ay_b-x_by_a)\right\}\right] \tag{3-64}$$

となることを示せ．ここで $T=t_b-t_a$，$\omega=eB/mc$ である．

問題 3-11　問題3-8の調和振動子が外力 $f(t)$ によって駆動される場合，ラグランジアンは

$$L=\frac{m}{2}\dot{x}^2-\frac{m\omega^2}{2}x^2+f(t)x \tag{3-65}$$

である．核が

$$K=\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega T}}\,e^{iS_{\rm cl}/\hbar}$$

となることを示せ．ここで $T=t_b-t_a$ として

$$S_{\rm cl}=\frac{m\omega}{2\sin\omega T}\left[(\cos\omega T)(x_b^2+x_a^2)-2x_bx_a\right.$$
$$+\frac{2x_b}{m\omega}\int_{t_a}^{t_b}dt\,f(t)\sin\omega(t-t_a)+\frac{2x_a}{m\omega}\int_{t_a}^{t_b}dt\,f(t)\sin\omega(t_b-t)$$
$$\left.-\frac{2}{m^2\omega^2}\int_{t_a}^{t_b}dt\int_{t_a}^{t}ds\,f(t)f(s)\sin\omega(t_b-t)\sin\omega(s-t_a)\right] \tag{3-66}$$

である．

この最後の結果は多くの高度の問題で大変重要であり，特に量子電気力学に応用されている．なぜなら電磁場は強制調和振動子の集団として表現されるからである．

問題 3-12　$t=0$ において調和振動子の波動関数が

$$\psi(x,0)=\exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-a)^2\right] \tag{3-67}$$

であるとき，式 (3-42) と問題3-8の結果を用いて

$$\psi(x,T)=\exp\left\{-\frac{i\omega T}{2}-\frac{m\omega}{2\hbar}\left[x^2-2axe^{-i\omega T}+\frac{a^2}{2}(1+e^{-2i\omega T})\right]\right\} \tag{3-68}$$

であることを示し確率分布 $|\psi|^2$ を求めよ．

3-7　多変数の系*)

複数の自由度をもつ系を考える．このような系に対しても核が式 (2-25) の形式に表現される．ここで記号 $x(t)$ は1つの座標だけでなく複数の座標を表すものと考えればよい．

最初の例として，3次元空間の中を運動する粒子を考える．経路は3つの関数 $x(t)$，$y(t)$，$z(t)$ を与えることにより定義される．たとえば，自由粒子の作用は

$$\frac{m}{2}\int_{t_a}^{t_b} dt[\dot{x}(t)^2+\dot{y}(t)^2+\dot{z}(t)^2]$$

である．時刻 t_a においてある初期位置 (x_a, y_a, z_a) から出発して時刻 t_b に終位置 (x_b, y_b, z_b) に到る振幅は

$$K(x_b, y_b, z_b, t_b\,;\, x_a, y_a, z_a, t_a) = \int_a^b \mathcal{D}x(t)\mathcal{D}y(t)\mathcal{D}z(t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} dt\ \frac{m}{2}(\dot{x}^2+\dot{y}^2+\dot{z}^2)\right] \tag{3-69}$$

である．微分は $\mathcal{D}x(t)\mathcal{D}y(t)\mathcal{D}z(t)$ のように表される．時間を ε の時間間隔に分割すると，時刻 t_i における位置は3変数 x_i，y_i，z_i によって与えられ，式 (2-22) のような表式の積分はそれぞれの i に対して dx_i, dy_i, dz_i について行われる．[もっと一般的に，位置をある s 次元空間におけるベクトル $\mathbf{r}$ で表すならば，それぞれの時刻における微分は体積要素 $dv_i=d^s\mathbf{r}_i$ でありすべての時刻についての積を $\mathcal{D}^s\mathbf{r}(t)$ と書く．]

式 (2-22) の定義を用いると，それぞれの時刻における各変数について規格化定数 A [式 (2-21)] を導入しなければならない．すなわち全時間間隔を長さ ε の N 個のステップに分割するならば，積分に因子 A^{-3N} をつけておかなければならない．

多変数で記述されるもう1つの例は2つの系が相互作用する場合である．一方の系は質量 m の粒子からなりその座標を x とする．もう一方の系は質量 M で座標 X の粒子からなる．これら2つの系がポテンシャル $V(x, X)$ によって相互作用しているものとする．作用は

$$S[x(t), X(t)]=\int_{t_a}^{t_b} dt\left[\frac{m}{2}\dot{x}^2+\frac{M}{2}\dot{X}^2-V(x, X)\right] \tag{3-70}$$

---

*) R.P. Feynman, Space-Time Approach to Non-relativistic Quantum Mechanics, *Rev. Mod. Phys.* **20** 371 (1948).

であるから核は

$$K(x_b, X_b, t_b ; x_a, X_a, t_a)$$

$$=\int_a^b \mathscr{D}x(t)\int_a^b \mathscr{D}X(t)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}S[x(t), X(t)]\right\} \tag{3-71}$$

となる．

式 (2-25) のこの一般化を数学的には理解できよう．そして座標 x，X からなるある抽象的な 2 次元空間における点の運動を考えることができよう．しかしながら，もっと物理的に x，X を座標とする 2 つの別々の粒子の運動を表現しているものと考えるほうが容易である．この場合 K は，質量 m の粒子が時空の点 (x_a, t_a) から (x_b, t_b) へ行き，質量 M の粒子が (X_a, t_a) から (X_b, t_b) へ行く振幅である．この核 K は，両方の粒子についてそれぞれの始点と終点の間のすべての可能な経路に関する振幅の和をとったものである．任意に経路[すなわち $x(t)$ と $X(t)$]の組み合わせを特定するとその振幅は $\exp(iS/\hbar)$ である．ここで S は式 (3-70) で定義される作用である．数学的にいえば，振幅は 2 つの独立関数 $x(t)$，$X(t)$ の汎関数であり，積分は両方の関数について汎関数積分を行ったものである．

3-8　分離可能な系

2 つの粒子があってそれぞれ 1 次元あるいは高次元の空間で運動している状況を考えよう．前節のように（ただし本節では 3 次元空間で表現する）一方の粒子の座標をベクトル $\mathbf{x}$ で表しもう一方の粒子の座標をベクトル $\mathbf{X}$ で表す．作用が 2 つの部分に分離できる場合がある．このとき

$$S[\mathbf{x}, \mathbf{X}]=S_x[\mathbf{x}]+S_X[\mathbf{X}] \tag{3-72}$$

となる．ここで S_x は経路 $\mathbf{x}(t)$ だけに依存し S_X は経路 $\mathbf{X}(t)$ だけに依存する．これは 2 つの粒子が相互作用しない場合である．

この場合，核は $\mathbf{x}$ に依存する因子と $\mathbf{X}$ に依存する因子との積となる．すなわち

$$K(\mathbf{x}_b, \mathbf{X}_b, t_b ; \mathbf{x}_a, \mathbf{X}_a, t_a)$$

$$=\int_a^b \mathscr{D}^3\mathbf{x}(t)\int_a^b \mathscr{D}^3\mathbf{X}(t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left\{S_x[\mathbf{x}]+S_X[\mathbf{X}]\right\}\right]$$

$$=\int_a^b \mathscr{D}^3\mathbf{x}(t)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}S_x[\mathbf{x}]\right\}\int_a^b \mathscr{D}^3\mathbf{X}(t)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}S_X[\mathbf{X}]\right\}$$

$$=K_x(\mathbf{x}_b, t_b ; \mathbf{x}_a, t_a)K_X(\mathbf{X}_b, t_b ; \mathbf{X}_a, t_a) \tag{3-73}$$

ここで K_x は座標 $\mathbf{x}$ をもつ粒子だけが存在するとしたときの振幅として定義され，

K_X も同様に定義される．したがって相互作用しない２つの独立な系に関する場合，両系の関わる事象の核は２つの独立な核の積である．この２つの核はそれぞれの粒子が関わる事象に対する核である．

多数の粒子が関わる状況における波動関数は，対応する核との類推で，$\psi(\mathbf{x},\mathbf{X},\cdots,t)$ として定義される．これは，時刻 t において１つの粒子が $\mathbf{x}$ にあり他の１つの粒子が $\mathbf{X}$ にあり…という事象の振幅として解釈される．波動関数の絶対値の２乗は１つの粒子が $\mathbf{x}$ にあり他の１つの粒子が $\mathbf{X}$ にあり…という事象の確率分布（$\mathbf{x}, \mathbf{X}\cdots$ について単位体積当たりの確率）である．１次元の場合に成り立つ式（3-42）を直ちに拡張して

$$\psi(\mathbf{x},\mathbf{X},\cdots,t)=\int d\mathbf{x}'\int d\mathbf{X}' K(\mathbf{x},\mathbf{X},\cdots,t\,;\,\mathbf{x}',\mathbf{X}',\cdots,t')\psi(\mathbf{x}',\mathbf{X}',\cdots,t') \tag{3-74}$$

と書くことができる．ここで $d\mathbf{x}'$ は $\mathbf{x}'$-空間の次元と同じ数の微分の積である．

２つの独立な粒子が座標系 $\mathbf{x}$，$\mathbf{X}$ で表される場合，上で述べたように，核 K は $\mathbf{x}$，t の関数と $\mathbf{X}$，t の関数との積である．しかしながら，このことは ψ が一般的に積の形になることを意味しない．ψ がある時刻に $\mathbf{x}$ の関数と $\mathbf{X}$ の関数との積である $[\psi=f(\mathbf{x})\cdot g(\mathbf{X})]$ という特別な場合に，ψ はその後も積の形でありつづける．それぞれの因子は部分系だけが存在しているかのように時間発展する．なぜなら核 K は２つの粒子の独立な運動を表現しているからである．しかしこれは特別な場合である．現在粒子が独立であるという理由だけでは常に独立であるということにならない．過去において相互作用があったかも知れない．このときは ψ は単純な積にならない．

もとの座標系で作用 S が単純な積の形にならない場合でも，ある変換（たとえば重心座標と内部座標）が存在して作用を分離できることがある．作用に対して量子力学も古典力学も同じ形式を用いるので，古典力学を変数分離する変換によって対応する量子力学も変数分離する．このように古典物理学の重要な部分をそのまま量子力学に適用することができるのである．このような変換は大変重要である．多変数からなる系を扱うのはむずかしいが，変数分離により複雑な問題をより単純な問題に還元することができる．

3-9　汎関数としての経路積分

問題が 2 つ以上の変数を含み，変数分離が可能でない場合，解析は一般に困難である．このような場合に適用できる近似法については後で議論する．ここではしばしば適用できる有力な方法を示す．式 (3-71) で与えられている核を考える．詳細に書くと次のようになる．

$$K(b, a)=\int_a^b \mathcal{D}x(t)\int_a^b \mathcal{D}X(t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}dt\ \frac{m}{2}\dot{x}^2+\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}dt\ \frac{M}{2}\dot{X}^2 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}dt\ V(x, X, t)\right] \tag{3-75}$$

最初に経路 $X(t)$ について積分するものとしよう．その結果は形式的に次のように書ける．

$$K(b, a)=\int_a^b \mathcal{D}x(t)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}dt\ \frac{m}{2}\dot{x}^2\right)T[x(t)] \tag{3-76}$$

ここで

$$T[x(t)]=\int_a^b \mathcal{D}X(t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}dt\ \left\{\frac{M}{2}\dot{X}^2 - V(x, X, t)\right\}\right] \tag{3-77}$$

である．

これらの結果は次のように解釈される．X 粒子にとって可能なすべての経路について積分すると**汎関数** T が得られる．汎関数はある関数を完全に特定したときに決まる数である．たとえば，曲線の下の面積は曲線 $y=f(x)$ の汎関数 $A=\int f(x)dx$ である．これを求めるには関数(曲線)を特定しなければならない．汎関数を $A[f(x)]$ と書き A が関数 $f(x)$ に依存することを表す．これを $A(f(x))$ と書かない．というのはこのように書くと関数の関数として誤解されやすいからである．つまり，A がある特定の点 x における f の値によるだけであると解釈されてしまう可能性がある．実際には $A[f(x)]$ は関数 $f(x)$ の全体の形によるのであり，x にはよらない．

式 (3-77) で定義された汎関数は，ポテンシャル V の影響の下で X 粒子のみが端点 X_a，X_b の間を動く振幅である．このポテンシャルは x と X に依存し，X が変化するとき x はある固定した経路であると仮定する．すなわち，x 粒子がある特定の軌道に沿って運動するとき，V は X 粒子に対するポテンシャルである．明らかに，この振幅 T は $x(t)$ の軌道に依存するから，$x(t)$ の汎関数として表される．した

がって自由粒子の振幅と T との積からなる汎関数をすべての経路 $x(t)$ について積分することにより全振幅が得られる．

このように振幅 K も，すべての可能な選択肢の振幅について和をとったものである．それぞれの振幅は2つの振幅の積である．1つの因子は x が特定の軌道をもつとき X 粒子が与えられた端点の間を動く振幅であり，もう1つの因子は x が特定の軌道をもつ振幅である．あらゆる選択肢についての最終的な和は，x のすべての可能な軌道についての和となる．この概念をはっきりと理解することが重要である．なぜなら後の章で述べるようにこの概念は量子電気力学の基本的な原理を含むからである．

もちろん，軌道 $x(t)$ のすべての値に対して積分 T が厳密であれ近似的であれ実際に計算できるのでなければ，この方法を使うのは実際的でない．前に述べたように（問題3-11参照）厳密に計算できる例の1つは X が調和振動子の場合である．これは非常に重要な実際的な場合である．たとえば，粒子が量子化された場と相互作用するとき，場は振動子である．

3-10　粒子と調和振動子の相互作用

粒子と調和振動子の相互作用をもっと詳細に考察しよう．粒子の座標を $\mathbf{x}$ とし振動子の座標を $\mathbf{X}$ とすると作用は次のように表される．

$$S[\mathbf{x},\mathbf{X}]=S_0[\mathbf{x}]+\int_{t_a}^{t_b}dt\ g[\mathbf{x}(t),t]\mathbf{X}(t)+\int_{t_a}^{t_b}dt\ \frac{M}{2}(\dot{\mathbf{X}}^2+\omega^2\mathbf{X}^2) \tag{3-78}$$

ここで S_0 は振動子がないときの粒子の作用である．上の議論で，この作用は自由粒子の作用に対応するものと仮定したが，この仮定は必要ではない．$\mathbf{x}$ の運動は $\mathbf{x}$ と t のみによるポテンシャルの存在によって複雑であってもよい．すなわち，たとえば，作用 S_0 は

$$S_0[\mathbf{x}]=\int_{t_a}^{t_b}dt\left[\frac{m}{2}\dot{\mathbf{x}}^2-V(\mathbf{x},t)\right] \tag{3-79}$$

という形でもよい．

式 (3-78) の第2項は粒子と振動子の相互作用を表す．この項が $\mathbf{X}$ について線形であることに注意．$\dot{\mathbf{X}}$ に対する依存性を省略したがこれによって一般性を失うわけではない．なぜならそのような項があっても部分積分によって取り除くことができるからである．係数 g を結合係数と呼ぶことができる．$\mathbf{x}(t)$ に対する依存性が表現されているが，他の変数［たとえば，$\dot{\mathbf{x}}(t)$］に依存してもよい．ここで示す解析は一

般的であるから g の厳密な形を書くことは重要でない．式 (3-78) の最後の項は，もちろん，振動子のみの作用である．これと第2項とを組みあわせて，式 (3-77) の関数 T が次のように表される．

$$T[\mathbf{x}(t)]=\int_a^b \mathcal{D}\mathbf{X}(t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}dt\left\{\frac{M}{2}(\dot{\mathbf{X}}^2-\omega^2\mathbf{X}^2)+g[\mathbf{x}(t),t]\mathbf{X}(t)\right\}\right] \quad (3\text{-}80)$$

$\mathbf{X}$ に関するかぎり，これは調和振動子の強制振動そのものである．駆動関数 $g[\mathbf{x}(t),t]$ は t のある特別な関数 $f(t)$ である．経路積分は問題3-11で扱ったものと同じであり，$f(t)$ を $g[\mathbf{x}(t),t]$ で置き換え，初めと終わりの座標 (x_b, x_a) を $(\mathbf{X}_b, \mathbf{X}_a)$ で置き換えればよい．

表式をやや簡単にして説明するために，振動子が初めと終わりで原点にある ($\mathbf{X}_b=\mathbf{X}_a=0$) という特別な場合を扱う．一般の場合を扱うのも同程度に容易である．この場合，問題3-11により，

$$T=\left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar i\sin\omega T}\right)^{1/2}\exp\left\{\frac{-i}{\hbar m\omega\sin\omega T}\right.$$
$$\left.\times\int_{t_a}^{t_b}dt\int_{t_a}^{t}ds\; g[\mathbf{x}(t),t]g[\mathbf{x}(s),s]\sin\omega(t_b-t)\sin\omega(s-t_a)\right\} \quad (3\text{-}81)$$

が得られる．したがって今考えている状況に対する核は次のように表される．

$$K(b,a)=\left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar i\sin\omega T}\right)^{1/2}\int_a^b\mathcal{D}x(t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left\{\frac{m}{2}\int_{t_a}^{t_b}dt\;\dot{\mathbf{x}}(t)^2-\frac{1}{m\omega\sin\omega T}\right.\right.$$
$$\left.\left.\times\int_{t_a}^{t_b}dt\int_{t_a}^{t}ds\; g[\mathbf{x}(t),t]g[\mathbf{x}(s),s]\sin\omega(t_b-t)\sin(s-t_a)\right\}\right] \quad (3\text{-}82)$$

任意の $(\mathbf{X}_b, \mathbf{X}_a)$ に対しても同様な表式が得られるがもっと複雑である．

これまで解かなければならなかった経路積分よりも複雑な表式である．後続の章でさまざまな近似法を展開するまで，これ以上先に進むことはできない．この経路積分の被積分関数がやはり $\exp(iS/\hbar)$ という形をしていることに注意．ただし S はもはや $\mathbf{x}$，$\dot{\mathbf{x}}$，t のみの関数ではなく，2つの異なる時刻で定義される変数の積を含むのである．未来と過去の分離ができなくなったのである．このようなことが起こるのは次のような理由による．変数 $\mathbf{x}$ はある前の時刻で振動子に影響を及ぼし，その振動子が後のある時刻に $\mathbf{x}$ に反作用を及ぼす．粒子が特定の時刻 t において特定の位置 $\mathbf{x}$ に存在する振幅を与えるような波動関数 $\psi(\mathbf{x},t)$ を定義することができない．そのような振幅は未来の状態を計算するために不十分である．なぜなら任意の時刻において振動子の運動状態を知らなければならないからである．

3-11 フーリエ級数による経路積分の評価

調和振動子の経路積分の問題を考察する（問題3-8）．それは次のような形をしている．

$$K(b, a)=\int_a^b \mathcal{D}x(t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}dt\ \frac{m}{2}(\dot{x}^2-\omega^2x^2)\right] \tag{3-83}$$

3-5節の方法を用いると，問題3-8のようにこの経路積分は2つの関数の積になる．2つの関数のうち，より重要なほうは調和振動子の古典的軌道に依存し，式（3-59）に与えられている．残りの関数は時間間隔のみに依存し，式（3-60）に表されている．この後者の関数は次のようにも表される．

$$F(T)=\int_0^0 \mathcal{D}y(t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^T dt\ \frac{m}{2}(\dot{y}^2-\omega^2y^2)\right] \tag{3-84}$$

経路積分を扱う別の方法の例として，少なくとも ω と独立な因子を除いてこれを解いてみよう．すべての経路 $y(t)$ は $t=0$ で0から出発し $t=T$ で0に到達するのであるから，このような経路は基本周期 T をもつフーリエ正弦級数として表すことができる．すなわち

$$y(t)=\sum_n a_n \sin\left(\frac{n\pi t}{T}\right) \tag{3-85}$$

経路をそれぞれの t における y の値の関数であると考える代わりに，係数 a_n の関数であると考えることができる．これは線形変換である．そのヤコビアン J は定数であり，明らかに ω，m，$\hbar$ によらない．

もちろん，このヤコビアンを直接求めることができる．しかしながら，ω によらないすべての因子（J も含めて）を集めて1つの定数因子とすることにより，J を計算することを避けることにする．われわれは常に最後に正しい因子を回復することができる．なぜなら $\omega=0$ のとき $F(T)=\sqrt{m/2\pi i\hbar T}$（自由粒子）となることを知っているからである．

作用は式（3-85）のフーリエ級数を用いて表される．運動エネルギーの項は

$$\begin{aligned}\int_0^T dt\ \dot{y}^2&=\sum_n\sum_m \frac{n\pi}{T}\,\frac{m\pi}{T}a_na_m\int_0^T dt\cos\frac{n\pi t}{T}\cos\frac{m\pi t}{T}\\&=T\cdot\frac{1}{2}\sum_n\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2a_n^2\end{aligned} \tag{3-86}$$

となり，ポテンシャルエネルギーの項は同様に

$$\int_0^T dt\, y^2 = T \cdot \frac{1}{2} \sum_n a_n^2 \tag{3-87}$$

となる．

(2-19)のように時間 T が長さ ε の離散的ステップに分割されていて，係数 a_n の個数は有限個 N であるという仮定をすると，経路積分は次のようになる．

$$F(T) = J \int_{-\infty}^{\infty} \frac{da_1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{da_2}{A} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{da_N}{A} \exp\left\{ \sum_{n=1}^{N} \frac{im}{2\hbar} \left[\left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 - \omega^2 \right] a_n^2 \right\} \tag{3-88}$$

この指数関数は因子に分解できるからそれぞれの係数 a_n についての積分を別々に行うことができる．そのような積分の 1 つを行ってみると結果は

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{da_n}{A} \exp\left[\frac{im}{2\hbar} \left(\frac{n^2\pi^2}{T^2} - \omega^2 \right) a_n^2 \right] \propto \left(\frac{n^2\pi^2}{T^2} - \omega^2 \right)^{-1/2} \tag{3-89}$$

となる．したがって経路積分は

$$\prod_{n=1}^{N} \left(\frac{n^2\pi^2}{T^2} - \omega^2 \right)^{-1/2} = \prod_{n=1}^{N} \left(\frac{n^2\pi^2}{T^2} \right)^{-1/2} \prod_{n=1}^{N} \left(1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2\pi^2} \right)^{-1/2} \tag{3-90}$$

に比例する．

最初の積は ω によらずヤコビアンと他の因子と組みあわされて 1 つの定数となる．第二の因子は $N \to \infty$（すなわち $\varepsilon \to 0$）のとき極限 $[(\sin \omega T)/\omega T]^{-1/2}$ をもつ．したがって

$$F(T) = C \left(\frac{\sin \omega T}{\omega T} \right)^{-1/2} \tag{3-91}$$

ここで C は ω によらない．しかし $\omega = 0$ のとき経路積分は自由粒子の経路積分であり，それについてはすでに

$$F(T) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar T} \right)^{1/2} \tag{3-92}$$

であることがわかっている．

したがって調和振動子に対して

$$F(T) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega T} \right)^{1/2} \tag{3-93}$$

が得られ，これを式 (3-59) に代入すれば完全な解が得られる．

問題 3-13　すべての定数を残しておくことにより，ヤコビアンが次の関係式を満たすことを示せ．

$$N \to \infty \text{ のとき} \qquad J\sqrt{N}\left(\frac{T}{\pi}\right)^{N} \prod_{n=1}^{N} \frac{1}{n} \to 1 \tag{3-94}$$

第4章　量子力学の Schrödinger 表示

これまで議論してきた経路積分は［(3-82) を例外として］,

$$S[2,1]=S[2,3]+S[3,1] \tag{4-1}$$

という性質をもつ作用の指数関数を被積分関数とするものであった.

そのような経路積分から積分方程式を導くことができ，その積分方程式の性質によって経路積分を解析することができる．このことはすでに第2章［たとえば (2-31)］と第3章［たとえば (3-42)］で見た.

経路積分を微分方程式に変換することができれば，もっと便利である．量子力学において，これは可能であり，実際，量子力学を表現するもっとも便利な方法である．ほとんどの場合，経路積分を直接評価するよりも微分方程式を解くほうが容易である．通常の量子力学の表現はこの微分方程式 (Schrödinger 方程式と呼ばれる) に基づいている．この章で経路積分からこの微分方程式を導く．多くの例について，この微分方程式自体を解くことはしない．なぜならそれらの解は他の量子力学の本で詳細にわたってまた満足できる程度に与えられているからである*).

この章の目的は2つある．(1)主として量子力学に関心のある読者に対して，この章の目的は，標準的な文献や教科書にあるいろいろな定式化と経路積分の定式化とを結び付けることである．このことにより読者は標準的な教科書で勉強を続けながら2つの異なる言語の間を行き来することができるようになる．(2)主として経路積分に関心のある読者に対して，この章である種類の経路積分を微分方程式に還元する技術を示す．ここで展開する量子力学の特殊例によってこの技術をわかりやすく示す.

4-1　Schrödinger 方程式

微分方程式形　微分方程式を求めることができる理由は，(4-1) の関係式が 1，2，3

---

*)　たとえば，L.I. Schiff, *Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, New York, 1955).

の時刻を任意にとっても成り立つからである．たとえば時刻 t_2 を時刻 t_3 よりも無限小の時間 ε だけ大きくとることもできる．このことにより，ある時刻における経路積分をわずかに後の時刻における経路積分と関係づけることができるのである．このようにして経路積分に対する微分方程式が得られる．

すでに見たように，(4-1) の帰結として波動関数を定義することができる．さらに方程式

$$\psi(x_2, t_2)=\int_{-\infty}^{\infty}dx_1\ K(x_2, t_2\ ;\ x_1, t_1)\psi(x_1, t_1) \tag{4-2}$$

により時刻 t_2 における波動関数が時刻 t_1 における波動関数によって表されるということも見てきた．核 $K(2, 1)$ は時間間隔 $[t_1, t_2]$ に対する作用に $i/\hbar$ を掛けたものの指数関数に比例する．短い時間間隔 ε に対して作用はこの時間間隔のラグランジアンに ε を掛けたものによって近似できる．すなわち (2-34) と同じ近似を用いて，

$$\psi(x, t+\varepsilon)=\int_{-\infty}^{\infty}dy\ \frac{1}{A}\exp\left[\varepsilon\frac{i}{\hbar}L\left(\frac{x-y}{\varepsilon}, \frac{x+y}{2}, t+\frac{\varepsilon}{2}\right)\right]\psi(y, t) \tag{4-3}$$

が得られる．

1次元でポテンシャル $V(x, t)$ の中を運動する粒子の特別な場合，すなわち $L=m\dot{x}^2/2-V(x, t)$ の場合に，この式を適用してみよう．この場合 (4-3) は

$$\begin{aligned}\psi(x, t+\varepsilon)=\int_{-\infty}^{\infty}dy\ \frac{1}{A}&\left\{\exp\left[\frac{i}{\hbar}\frac{m(x-y)^2}{2\varepsilon}\right]\right\}\\ &\times\left\{\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\varepsilon V\left(\frac{x+y}{2}, t+\frac{\varepsilon}{2}\right)\right]\right\}\psi(y, t)\end{aligned} \tag{4-4}$$

となる．最初の指数部分に $(x-y)^2/\varepsilon$ が現れる．y が x から有限だけ離れていると $(x-y)^2/\varepsilon$ は $\varepsilon\to 0$ で非常に大きくなるので指数因子 $\exp[(i/\hbar)m(x-y)^2/2\varepsilon]$ は y の変動に対して非常に急激に振動する．この因子が急激に振動するとき，y についての積分が非常に小さくなる(他の因子は緩やかに変動するので)．y が x に近いときに限り(このとき指数因子はゆっくり変化する)，主要な寄与が得られる．この理由により，$y=x+\eta$ とおくと η が小さいところだけが積分の主要な寄与を与えるものと期待できるのである．代入すると

$$\psi(x, t+\varepsilon)=\int_{-\infty}^{\infty}d\eta\ \frac{1}{A}e^{im\eta^2/2\hbar\varepsilon}e^{-(i\varepsilon/\hbar)V(x+\eta/2, t)}\psi(x+\eta, t) \tag{4-5}$$

が得られる．最初の指数因子の位相は η が $\sqrt{\varepsilon\hbar/m}$ の程度のときに1ラジアン程度

変動するので，積分の主要な寄与はこの程度の η の値によるのである．

ψ をべき級数に展開することもできる．ε の1次の項だけをとればよい．これは，η の2次までとることを意味する．$\varepsilon V(x+\eta/2, t)$ は $\varepsilon V(x, t)$ で置き換えることができる．その誤差は ε の高次である．左辺を ε の1次まで展開し，右辺を ε の1次までおよび η の2次まで展開すると，

$$\psi(x, t)+\varepsilon\frac{\partial\psi}{\partial t}=\int_{-\infty}^{\infty}d\eta\,\frac{1}{A}e^{im\eta^2/2\hbar\varepsilon}\left[1-\frac{i\varepsilon}{\hbar}V(x, t)\right]$$
$$\times\left[\psi(x, t)+\eta\frac{\partial\psi}{\partial x}+\frac{1}{2}\eta^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right] \tag{4-6}$$

が得られる．右辺の主要項をとると，$\psi(x, t)$ に次の積分を掛けたものが得られる．

$$\frac{1}{A}\int_{-\infty}^{\infty}d\eta\; e^{im\eta^2/2\hbar\varepsilon}=\frac{1}{A}\left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{1/2} \tag{4-7}$$

左辺の主要項は $\psi(x, t)$ そのものである．両辺が $\varepsilon\to 0$ の極限で一致するためには (4-7) の表式が1となるように A を選ばなければならない．すなわち，前に見たように［(2-21) 参照］

$$A=\left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{1/2} \tag{4-8}$$

となる．このような方法で，もっと複雑な問題においても，A という量を求めることができる．方程式が ε の0次で正しいように A を選ばなければならない．そうでないと，もとの経路積分で $\varepsilon\to 0$ の極限が存在しないことになる．

(4-6) の右辺を評価するために次の2つの積分を使わなければならない．

$$\int_{-\infty}^{\infty}d\eta\;\frac{1}{A}e^{im\eta^2/2\hbar\varepsilon}\eta=0 \tag{4-9}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}d\eta\;\frac{1}{A}e^{im\eta^2/2\hbar\varepsilon}\eta^2=\frac{i\hbar\varepsilon}{m} \tag{4-10}$$

(4-6) の右辺を求めると，

$$\psi+\varepsilon\frac{\partial\psi}{\partial t}=\psi-\frac{i\varepsilon}{\hbar}V(x, t)\psi-\frac{\hbar\varepsilon}{2im}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \tag{4-11}$$

が得られる．もし ψ が次の微分方程式を満たすならば，これは ε の1次で正しい．

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V(x, t)\psi \tag{4-12}$$

これは1次元の運動をする粒子の問題に対するSchrödinger方程式である．以下

の問題で示すように，もっと複雑な状況においても同様に対応する方程式が得られる．

問題 4-1　3次元空間でポテンシャル V の中で運動する1つの粒子に対して Schrödinger 方程式が

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V\psi \tag{4-13}$$

であることを示せ．この方程式は Schrödinger によって1925年に発見され，その後の量子力学の発展において中心的な役割をした．

演算子形　いろいろな形のラグランジアンに対応する問題から得られる方程式はすべて便宜上

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi \tag{4-14}$$

という形式に表すことができる．ここで H は数を表すのでなく ψ にかける演算を表し，ハミルトン演算子（ハミルトニアン）と呼ばれる．たとえば，(4-12) において，この演算は

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V \tag{4-15}$$

である．

このように両辺に演算子をもつ方程式の意味は次のようである．両辺でそれぞれの演算子の後に任意の関数 f が書かれていれば，その方程式は意味をもつ．すなわち (4-15) は次の命題を記号化したものである：任意の関数 f に対して関係式

$$Hf=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}+Vf \tag{4-16}$$

が成り立つ．

問題 4-2　磁場中の荷電粒子のラグランジアンは

$$L=\frac{m\dot{r}^2}{2}+\frac{e}{c}\dot{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{A}-e\phi \tag{4-17}$$

である．ここで $\dot{\mathbf{r}}$ は速度ベクトル，e は電荷，c は光速，$\mathbf{A}$ はベクトルポテンシャル，ϕ はスカラーポテンシャルである．対応する Schrödinger 方程式が

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\cdot\left(\frac{\hbar}{i}\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi+e\phi\psi \tag{4-18}$$

であることを示せ．したがってハミルトニアンは

$$H=\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\cdot\left(\frac{\hbar}{i}\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)+e\phi \tag{4-19}$$

である．

問題 4-3　ψ の中の i をすべて $-i$ で置き換えたものとして定義される複素共役関数 ψ^* が

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=(H\psi)^* \tag{4-20}$$

を満たすことを示せ．

演算子という概念はいくつかの例を与えることにより説明することができる．たとえば，演算子 x は x を掛けることを表す．演算子 x^2 は x^2 を掛けることを表す．演算子 $V(x)$（x の関数）は $V(x)$ を掛けることを表す．演算子 $\partial/\partial x$ は x についての偏微分，$\partial\psi/\partial x$ を表す．

A と B が演算子のとき，演算子 AB は初めに B を掛け次に A を掛けることを意味する．すなわち $AB\psi$ は $A(B\psi)$ を意味する．したがって，たとえば，演算子 $x(\partial/\partial x)$ は x を $\partial\psi/\partial x$ に掛けることを意味する．一方，演算子 $(\partial/\partial x)x$ は $x\psi$ を x について偏微分することを意味する．すなわち $(\partial/\partial x)(x\psi)=x(\partial\psi/\partial x)+\psi$．

一般に演算子 AB と演算子 BA は同じでない．演算子 $A+B$ を次の規則によって定義する．$A+B$ を ψ に掛けた結果は $A\psi+B\psi$ である．たとえば，上記の式は演算子の間の関係式として次のように表される．

$$\frac{\partial}{\partial x}x=x\frac{\partial}{\partial x}+1 \tag{4-21}$$

この意味は任意の関数 f に対して $(\partial/\partial x)xf=x(\partial/\partial x)f+f$ が成り立つということである．

問題 4-4　関係式

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}x=x\frac{\partial^2}{\partial x^2}+2\frac{\partial}{\partial x} \tag{4-22}$$

が成り立つことを示し，(4-15) の H に対して

$$Hx-xH=-\frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x} \tag{4-23}$$

を示せ．

通常の量子力学の定式化で，この演算子の表現が非常によく使われる．

振幅に対する Schrödinger 方程式　$K(2,1)$ を変数 2 の関数と考えると，これは特殊な波動関数である（すなわち，1から出発する粒子に対する波動関数である）から，K も Schrödinger 方程式を満たさなければならないことがわかる．(4-15) の場合，$t_2>t_1$ に対して

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_2}K(2,1)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}K(2,1)+V(2)K(2,1) \tag{4-24}$$

である．一般に $t_2>t_1$ に対して

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial K(2,1)}{\partial t_2}-H_2K(2,1)=0 \qquad t_2>t_1 \tag{4-25}$$

となる．ここで演算子 H_2 は変数 2 のみに掛かる．

問題 4-5　$t_3-t_1=\varepsilon$（無限小）として，関係式

$$K(2,1)=\int_{-\infty}^{\infty}dx_3\ K(2,3)K(3,1) \tag{4-26}$$

を用いて，$t_2>t_1$ のとき振幅 K が

$$+\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_1}K(2,1)-H_1^*K(2,1)=0 \tag{4-27}$$

を満たすことを示せ．ここで H_1 は変数1のみに掛かる．また記号 $*$ は，演算子の中の i を $-i$ でおきかえることを意味する．

(2-25) の経路積分によって定義される関数 $K(2,1)$ は $t_2>t_1$ でのみ定義されている．この関数は $t_2<t_1$ のときは定義されない．後の議論 (たとえば，第 6 章) で $t_2<t_1$ のときに $K(2,1)=0$ と定義すると便利であることがわかる．[この約束では，たとえば，(4-2) は $t_2>t_1$ のときのみ有効である．] この条件

$$K(2,1)=0 \qquad [t_2<t_1] \tag{4-28}$$

により (4-25) が $t_2<t_1$ のときも満たされていることは明らかである (もちろん，$K=0$ であるから自明である)．しかしこの式は $t_2=t_1$ で満たされていない．なぜなら $K(2,1)$ は $t_2=t_1$ で不連続だからである．

問題 4-6　$t_2\to t_1+0$ に対して $K(2,1)\to\delta(x_2-x_1)$ となることを示せ．

問題4-6の結果から，K を t_2 について微分すると時間についてのデルタ関数とジャンプの高さ $\delta(x_2-x_1)$ とを掛けたものが得られることがわかる．これより $K(2, 1)$ は次の方程式を満たす．

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial K(2,1)}{\partial t_2}-H_2K(2,1)=-\frac{\hbar}{i}\delta(x_2-x_1)\delta(t_2-t_1) \tag{4-29}$$

量子力学の基本的定義としてSchrödinger方程式から出発するとすれば，この方程式と（4-28）の境界条件とが$K(2,1)$の定義を与えることになる．$K(2,1)$がSchrödinger方程式に対するある種のグリーン関数であることは明らかである．

確率の保存　(4-15)で与えられたハミルトン演算子は次のような興味ある性質をもつ．f，gが無限遠点で0になる任意の関数であるとき

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx\ (Hg)^*f=\int_{-\infty}^{\infty}dx\ g^*(Hf) \tag{4-30}$$

となる．この記号の意味を述べると次のようになる．左辺でgにHを掛け（Hgがつくられる）それからその複素共役をとる．その結果にfを掛け全空間について積分する．その結果は，Hfにgの共役複素数を掛けて積分したものと同じである．このことが正しいことは，$\int dx\ (Hg)^*f$を積分する（必要ならば部分積分する）ことにより容易に確かめられる．

（4-15）の例では（4-30）の左辺に対して（部分積分を2回行うことにより），

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}dx\ \frac{d^2g^*}{dx^2}f+\int_{-\infty}^{\infty}dx\ Vg^*f=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{dg^*}{dx}f-g^*\frac{df}{dx}\right]_{-\infty}^{+\infty} -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}dx\ g^*\frac{d^2f}{dx^2}+\int_{-\infty}^{\infty}dx\ Vg^*f \tag{4-31}$$

が得られる．f，gが無限遠点で0になるならば，右辺の第1項は0となる．よって（4-30）が確かめられる．（4-30）の性質をもつ演算子は**エルミート演算子**と呼ばれる．量子力学のすべての場合でハミルトニアンはエルミート演算子である．上では1次元の変数xについての積分であったが，もっと一般の場合には系のすべての変数についての積分あるいは和となる．

$f=g=\psi(x,t)$とおくと

$$\int dx\ (H\psi)^*\psi=\int dx\ \ \psi^*(H\psi) \tag{4-32}$$

が得られる．ψが波動方程式（4-14）を満たすならば，これより

$$\int dx\ \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi+\int dx\ \ \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{d}{dt}\left(\int dx\psi^*\psi\right)=0 \tag{4-33}$$

が得られる．

すなわち$\int \psi^* \psi\, dx$は時間によらない定数である．これには容易に次のような解釈を与えることができる．ψが適当に規格化されていれば，$\psi^*\psi$はxに見出される確率である．よってその積分はいずれかの場所において見出される確率であるから定数である(必ずどこかで見出される)．もちろん波動方程式に関するかぎりψにどんな定数を掛けてもまた解である．このとき$\psi^*\psi$はこの定数の2乗倍となり，その積分もこの定数の2乗倍となる．

ψを確率振幅と定義する場合に，$\psi^*\psi$の積分が定数であるということが本質的に重要である．核に関していえば，fが時刻t_1における波動関数ならば時刻t_2においても同じ2乗積分をもつということを意味する．すなわち，

$$\psi(2)=\int dx_1\ K(2,1)f(1) \tag{4-34}$$

ならば

$$\int dx_2\ \psi^*(2)\psi(2)=\int dx_1\ f^*(1)f(1) \tag{4-35}$$

である．すなわち

$$\int dx_2 \int dx_1 \int dx_1'\ K^*(2;x_1',t_1)K(2;x_1,t_1)f^*(x_1')f(x_1)=\int dx_1\ f^*(x_1)f(x_1) \tag{4-36}$$

これが任意のfに対して成り立つための必要条件は

$$\int dx_2\ K^*(2;x_1',t_1)K(2;x_1,t_1)=\delta(x_1'-x_1) \tag{4-37}$$

である．

すなわちψを確率振幅として解釈するためには核が(4-37)を満たさなければならない．われわれはこれをSchrödinger方程式を使って導いた．これと他の性質[たとえば(4-38)と問題4-7]を，微分方程式を経由しないで直接経路積分によるKの定義から導き出せれば素晴らしいであろう．もちろんそれは可能であるが，このような基本的関係式の導出としては単純でなくかつ奇麗でない．(4-37)を次のようにして証明することができる．短い時間間隔$t_2-t_1=\varepsilon$に対して(4-37)はこの時間間隔に対する表式$\exp(i\varepsilon L/\hbar)$から直接導かれる．これをくりかえすと，帰納法により完全な(4-37)が得られる．しかしながら，経路積分による量子力学の構成の欠点はψ^*やK^*に関する関係が自明でないことである．

(4-37)に$K(1,3)$を掛けx_1について積分することにより次の関係式を示すことができる．

$$\int dx_2 \ K^*(2,1)K(2,3)=K(1,3) \tag{4-38}$$

ここで $t_2>t_1>t_3$ である．これを $t_1>t_2>t_3$ に対する式 $\int K(1,2)K(2,3)dx_2=K(1,3)$ と比較せよ．この 2 番目の関係式を次のように記述することができる．t_3 から出発すると $K(2,3)$ は後の時刻 t_2 における振幅を与える．さらに後の時刻 t_1 に行こうと思うならば核 $K(1,2)$ を用いればよい．一方，t_2 において振幅をもっているときに以前の時刻 $t_1<t_2$ における振幅を遡って求めようとすれば，(4-38)に従って関数 $K^*(2,1)$ を用いればよい．すなわち $K^*(2,1)$ は $K(1,2)$ の作用をもとに戻す，ということができる．

問題 4 - 7　$t_1<t_3$ ならば，(4-38) の左辺が $K^*(3,1)$ と等しいことを示せ．

4 - 2　時間に依存しないハミルトニアン

エネルギー一定の定常状態　ハミルトニアン H が時間に依存しないという特別の場合が実際上非常に重要である．これは作用（むしろラグランジアン）が時間に陽によらない場合に対応する．すなわちたとえばポテンシャル $\mathbf{A}$，V が時間 t を含まない．この場合，核は絶対時間によらず時間間隔 t_2-t_1 のみの関数である．この事実の結果として，時間に周期的に依存する波動関数が存在する．

微分方程式を研究することにより何が起こるかを見るのは容易である．Schrödinger 方程式 (4-14) から出発して，時間の関数と位置の関数の積 $\psi=f(t)\phi(x)$ という形の特別な解を求めてみよう．これを代入すると次の関係式が得られる．

$$-\frac{\hbar}{i}f'(t)\phi(x)=Hf(t)\phi(x)=f(t)H\phi(x) \tag{4-39}$$

すなわち

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{f'}{f}=\frac{1}{\phi}H\phi \tag{4-40}$$

この式の左辺は x に依存せず，右辺は t に依存しない．もし両辺が常に等しいならば，両辺とも t にも x にも依存しない．すなわち各辺は同じ定数でなければならない．この定数を E とすると，$f'=-(i/\hbar)Ef$ となるから f は $\exp(-iEt/\hbar)$ に任意定数を掛けたものである．したがって特殊解は次の形をしている．

$$\psi(x,t)=e^{-(i/\hbar)Et}\phi(x) \tag{4-41}$$

ここで ϕ は

$$H\phi=E\phi \tag{4-42}$$

を満たす.

すなわち，この特殊解の場合，波動関数は一定の振動数で振動する．この波動関数の振動数が古典力学のエネルギーに対応することを前に見た．したがって波動関数がこの特殊な形をしているとき，その状態は一定のエネルギーをもつということができる．E のそれぞれの値に対して，対応する特殊解 ϕ [(4-42) の解] を求めなければならない.

粒子が x にいる確率は波動関数 ψ の絶対値の2乗 $|\psi|^2$ である．(4-41)よりこれは $|\phi|^2$ に等しく時間によらないことがわかる．すなわち粒子を任意の場所に見出す確率は時間によらないのである．このような状況にあるとき，系は定常状態にあるという．定常というのは，確率が時間の関数として変化しないという意味である.

この状況は不確定性原理とも関わっている．エネルギーが厳密に E であることがわかっている状況では，時間が完全に不確定であるからである．このことは次のような考え方と一致している．ある特定の状態にある原子の性質は時間に全くよらず，どの時刻においても同じ結果が得られる.

(4-42) がある解 ϕ_1 をもち，対応するエネルギーを E_1 とする．また他の解 ϕ_2 に対応するエネルギーを E_2 とする．そのとき Schrödinger 方程式の2つの解は

$$\psi_1=e^{-(i/\hbar)E_1t}\phi_1(x) \text{ と } \psi_2=e^{-(i/\hbar)E_2t}\phi_2(x) \tag{4-43}$$

である．Schrödinger 方程式は線形であるから，ψ が解であれば $c\psi$ も解であることは明らかである．さらに，もし ψ_1 と ψ_2 が解であるならば，ψ_1 と ψ_2 の和も解である．よって，明らかに

$$\psi=c_1e^{-(i/\hbar)E_1t}\phi_1(x)+c_2e^{-(i/\hbar)E_2t}\phi_2(x) \tag{4-44}$$

もまた Schrödinger 方程式の解である.

実際，可能なすべての E の値と対応するすべての解 ϕ が得られたならば，(4-14) の任意の解はこれらのエネルギーの解の1次結合で表される.

4-1節で述べたように，いずれかの場所に見出される全確率は一定である．このことは c_1 と c_2 の値がなんであろうとも成り立たなければならない．ψに対して (4-44) を用いると

$$\int dx\ \psi^*\psi=c_1^*c_1\int dx\ |\phi_1|^2+c_1^*c_2e^{(i/\hbar)(E_1-E_2)t}\int dx\ \phi_1^*\phi_2$$

$$+c_1c_2^*e^{-(i/\hbar)(E_1-E_2)t}\int dx\ \phi_1\phi_2^*+c_2^*c_2\int dx\ |\phi_2|^2 \tag{4-45}$$

が得られるが，これが一定でなければならないから，時間的に変動する項［すなわち $\exp\{\pm(i/\hbar)(E_1-E_2)\}$ を含む項］は c_1，c_2 をどのように選んでも 0 でなければならない．このことは

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx\ \phi_1^*\phi_2=\int_{-\infty}^{\infty}dx\ \phi_1\phi_2^*=0 \tag{4-46}$$

を意味する．2 つの関数 f，g が $\int f^*g\,dx=0$ を満たすとき f と g は直交しているという．したがって (4-46) の意味は，異なるエネルギーをもつ 2 つの状態が直交するということである．

後で $\int f^*g\,dx$ のような表式の解釈について述べるが，(4-46) は次の事実を示す．粒子がエネルギー E_1 をもつ［したがって波動関数 $\psi_1=\phi_1\exp(-iE_1t/\hbar)$ をもつ］ことがわかっているとき，この粒子が異なるエネルギー E_2 をもつ［したがって波動関数 $\psi_2=\phi_2\exp(-iE_2t/\hbar)$ をもつ］振幅は 0 でなければならない，ということである．

問題 4-8　H がエルミート演算子であるという事実から E が実数であることを示せ．［(4-30) において $f=g=\phi$ とおけ］

問題 4-9　H がエルミート演算子であるという事実から (4-46) が成り立つことを示せ．［(4-30) において $f=\phi_2$，$g=\phi_1$ とおけ］

定常状態関数の 1 次結合　エネルギー準位 E_n の集合に対応する関数系が直交しているだけでなく規格化されている（すなわち絶対値の 2 乗をすべての x について積分したものが 1 である）ものとする．このとき

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx\ \phi_n^*(x)\phi_m(x)=\delta_{nm} \tag{4-47}$$

となる．ここでクロネッカーのデルタ δ_{nm} は $\delta_{nm}=0\,(n\neq m)$，$\delta_{nn}=1$ によって定義される．多くの関数はこのような ϕ_n の 1 次結合として表される．特に波動関数として現れてくるような関数はこのようにして表されるのである．すなわち

$$f(x)=\sum_{n=1}^{\infty}a_n\phi_n(x) \tag{4-48}$$

係数 a_n は容易に求められる．(4-48) に $\phi_m^*(x)$ を掛け，すべての x について積分すると

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \phi_m^* f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \phi_m^* \phi_n = a_m \tag{4-49}$$

が得られる．すなわち

$$a_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \phi_n^*(x) f(x) \tag{4-50}$$

したがって次の恒等式が成り立つ．

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x) \int_{-\infty}^{\infty} dy\ \phi_n^*(y) f(y) = \int_{-\infty}^{\infty} dy\ \left[\sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x) \phi_n^*(y)\right] f(y) \tag{4-51}$$

この結果を表す別の興味ある方法としては，デルタ関数の定義を使う．すなわち

$$\delta(x-y) = \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x) \phi_n^*(y) \tag{4-52}$$

と書く．

関数 ϕ_n とエネルギー値 E_n を用いて核 K を表すことができる．これを次のような考察により行う．$f(x)$ が時刻 t_1 において知られている波動関数である場合に，時刻 t_2 における波動関数は何かを考えてみよう．任意の時刻 t における波動関数は

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-(i/\hbar)E_n t} \phi_n(x) \tag{4-53}$$

と表される．なぜならそれは Schrödinger 方程式の解であり任意の解は (4-53) の形に書けるからである．一方時刻 t_1 において

$$f(x) = \psi(x, t_1) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-(i/\hbar)E_n t_1} \phi_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \phi_n(x) \tag{4-54}$$

となる．なぜなら $f(x)$ は常に (4-48) の形に表されるからである．よって

$$c_n = a_n e^{+(i/\hbar)E_n t_1} \tag{4-55}$$

と結論することができる．これを (4-53) に代入すると

$$\psi(x, t_2) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-(i/\hbar)E_n t_2} \phi_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{+(i/\hbar)E(t_1 - t_2)} \phi_n(x) \tag{4-56}$$

が得られる．次に係数 a_n について (4-50) を用いると，

$$\psi(x, t_2) = \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x) e^{-(i/\hbar)E_n(t_2 - t_1)} \int_{-\infty}^{\infty} dy\ \phi_n^*(y) f(y)$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} dy\ \left[\sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x) \phi_n^*(y) e^{-(i/\hbar)E_n(t_2 - t_1)}\right] f(y) \tag{4-57}$$

が得られる．

この最後の表式により時刻 t_2 における波動関数が時刻 t_1 における波動関数 $f(x)$

によって完全に決定される．以前にこの関係を

$$\psi(x, t_2)=\int_{-\infty}^{\infty}dy\ K(x, t_2\ ;\ y, t_1)f(y) \tag{4-58}$$

という式によって表した．これを (4-57) と較べることにより，核 $K(2,1)$ に対する表式が得られる．

$$K(x_2, t_2\ ;\ x_1, t_1)=\begin{cases}\displaystyle\sum_{n=1}^{\infty}\phi_n(x_2)\phi_n^*(x_1)e^{-(i/\hbar)E_n(t_2-t_1)} & t_2>t_1\\ 0 & t_1>t_2\end{cases} \tag{4-59}$$

問題 4 -10　(4-59) で定義される K が Schrödinger 方程式 (4-29) を満たすことを確かめよ．

K のこの表式は，経路積分の式を通常の表現に書き換えるときに大変役立つ．本来経路積分であった核を微分方程式 (4-42) の解を用いて完全に表現している．

問題 4 -11　3 次元の自由粒子に対して，解

$$\phi_{\mathbf{p}}=e^{(i/\hbar)\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \tag{4-60}$$

がエネルギー $E_p=p^2/2m$ に対応していることを示せ．ベクトル $\mathbf{p}$ を解の番号 n と考え直交性に注意せよ．すなわち $\mathbf{p}\neq\mathbf{p}'$ であるかぎり，$E_{\mathbf{p}}=E_{\mathbf{p}'}$ であっても

$$\int d^3\mathbf{r}\ \ \phi_{\mathbf{p}}^*\phi_{\mathbf{p}'}=0 \tag{4-61}$$

である．したがって自由粒子の核は

$$K_0(\mathbf{r}_2, t_2\ ;\ \mathbf{r}_1, t_1)=\sum_{\mathbf{p}}e^{(i/\hbar)\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1)}e^{-ip^2(t_2-t_1)/2\hbar m} \tag{4-62}$$

でなければならない．$\mathbf{p}$ は連続的に分布しているから「番号」$\mathbf{p}$ についての和は実際上 $\mathbf{p}$ についての積分と等価である．すなわち

$$\sum_{\mathbf{p}}(\quad)=\int\frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}(\quad) \tag{4-63}$$

したがって，自由粒子の核が

$$K_0(\mathbf{r}_2, t_2\ ;\ \mathbf{r}_1, t_1)=\int\frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}e^{(i/\hbar)\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1)-ip^2(t_2-t_1)/2m\hbar} \tag{4-64}$$

で与えられることがわかる．

問題 4 -12　指数部分を完全平方式にすることにより (4-64) の積分を行え．自由粒子の核の形［(3-3) の 3 次元版］が導かれることを示せ．

4-3　自由粒子波動関数の規格化

問題4-11に与えられているような自由粒子に対する核の導出は，2つの関連した理由により不十分なものである．第一に，自由粒子の場合に任意の $\mathbf{p}$ が可能であるから $\mathbf{p}$ は連続量である．よって (4-62) で用いられた状態 n についての和の考えは不満足なものである．第二に，自由粒子に対する平面波は直交しているが規格化はできない．すなわち $\int\phi^*\phi\,dx=\int 1dx=\infty$ となるので(4-62)を導くときに用いた(4-47)の条件は満たされない．これら2つの欠点は完全に直接的な数学的方法により除かれる．任意の関数を固有関数の和で表す場合に立ち戻って

$$f(x)=\sum_n a_n\phi_n(x) \tag{4-65}$$

と表して，状態の一部あるいは全部が連続状態にあることも許すことにする．その際，和の一部を積分で置き換える．数学的に注意深く行えば，状態が連続状態にあるときにも適用できるような(4-62)に類似の K の正しい表式を得ることができる．

箱の中の規格化　多くの物理屋はもっと厳密でない方法を好む．彼らのやりかたは，物理的理由により本来の問題を変えて，結果が本質的に変更されないようにしつつ，かつすべての状態が分離したエネルギーをもつようにし単純和はそのまま単純和のままであるようにするのである．ここでの例については次のようにする．有限の時間に粒子が x_1t_1 から x_2t_2 に行く振幅を求める．これら2点が有限の距離だけ離れていて時間が極端に長くなければ，確かに，電子が実際に自由であろうが，あるいは x_1，x_2 から遠く離れた所にある壁によって区切られた大きな箱の中に閉じ込められていようが，大差はない．粒子が時間 t_2-t_1 の間に壁の所まで行きそして引き返すことができるという場合のみ，振幅は影響を受けるであろう．しかし壁が十分遠くにあればこれによる振幅への影響は認められないであろう．

壁がある特別の形をしているときこの仮定が破れることが常に可能である．たとえば x_1 からの波が壁で反射されるとき x_2 がその焦点に位置する場合である．しばしば真空中の系を大きな球形の箱の中心にある系に置き換えることにより誤りを犯す場合がある．系が完全球の中心に正確に位置していると（完全に円形の物体の内側の中心にある光源のように），球の半径を無限大にしても消えない効果がある．他の形の場合や，系が中心からずれている場合，表面の効果は消える．

初めに1次元の場合を考えよう．真空における空間依存の波動関数は $\exp(ipx/\hbar)$ である［p は任意，正でも負でもよい］．もし x の領域が $-L/2$ から $+L/2$ までに限定されているならば，関数 ϕ はどのようになるであろうか．その答えは，$x=-L/2$ と $x=L/2$ における ϕ の境界条件に依存する．物理的に理解しやすい条件は，非常に強い反発力のポテンシャルを粒子に及ぼし粒子を閉じ込めるような壁(完全反射壁) の場合である．この場合 $x=-L/2$ と $x=L/2$ において $\phi(x)=0$ となる．$|x|<L/2$ における波動方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}=E\phi \qquad (4\text{-}66)$$

の解は，$E=p^2/2m=\hbar^2k^2/2m$ のとき e^{ikx}，e^{-ikx} あるいはそれらの1次結合である．e^{ikx} も e^{-ikx} も境界条件を満たさないが，$k=n\pi/L$ (n は整数) のとき，n が奇数ならば2つの和の1/2(すなわち $\cos kx$)，n が偶数ならば2つの差に $1/2i$ を掛け

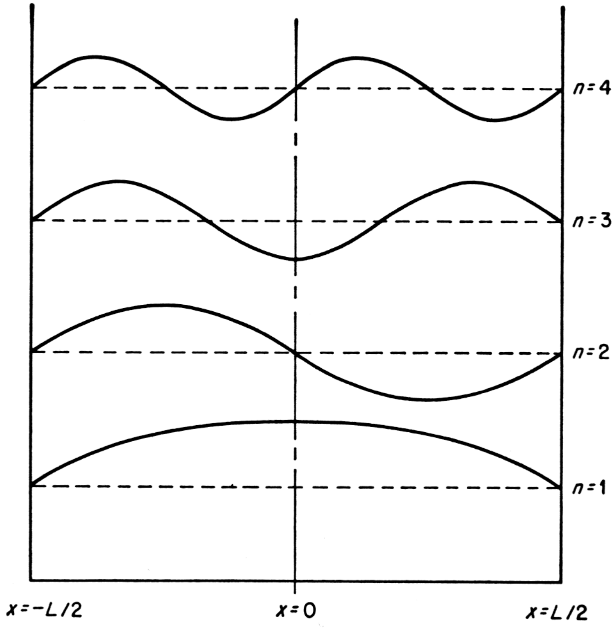


図4-1　箱の中で規格化された1次元波動関数の形．最初から4番目までを図示する．対応するエネルギー準位は $E_1=\hbar^2\pi^2/2mL^2$，$E_2=4E_1$，$E_3=9E_1$，$E_4=16E_1$ である．エネルギーの絶対値は仮想的な箱の大きさに依存するが，より現実的な問題に対しては重要でない．むしろ，重要なのは異なる状態のエネルギー準位の間の関係である．

たもの（すなわち $\sin kx$）が境界条件を満たす解として得られる（図4-1を見よ）．したがって状態は正弦関数か余弦関数であり，エネルギー準位は分かれている（連続状態でない）．

解を

$$\sqrt{\frac{2}{L}}\cos kx \text{ および } \sqrt{\frac{2}{L}}\sin kx$$

と表すとき，これらは規格化されている．なぜなら

$$\int_{-L/2}^{L/2} dx\left(\sqrt{\frac{2}{L}}\cos x\right)^2=1 \tag{4-67}$$

となるからである．状態についての和は n についての和となる．L は大きいが，x は大きくない（壁が x から遠くにある）場合に正弦関数（n が偶数）を考えると，隣り合う状態の波動関数はわずかしか違わない．実際その差は，

$$\begin{aligned}\sqrt{\frac{2}{L}}\left[\sin 2\pi(n+1)\frac{x}{L}-\sin 2\pi n\frac{x}{L}\right]&=2\sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(2\pi\frac{2n+1}{2}\frac{x}{L}\right)\sin\left(2\pi\frac{x}{2L}\right)\\&\simeq\sqrt{\frac{2}{L}}\frac{2\pi x}{L}\cos\left[2\pi\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{x}{L}\right]\end{aligned} \tag{4-68}$$

は近似的に微小量 x/L に比例する．よって n についての和は $k=2\pi n/L$ についての積分で置き換えることができる．正弦関数について可能な k の値は $2\pi/L$ の間隔で並んでいるので Δk の領域に $L\Delta k/2\pi$ 個の状態がある．以上のことは余弦波動関数についてもあてはまるので方程式の中の和を

$$\sum_{n=0}^{\infty}(\quad)\to\int_0^{\infty}\frac{dk}{2\pi}\ L(\quad) \tag{4-69}$$

により積分に置き換える．そして2種の波動関数，すなわち $\sqrt{2/L}\cos kx$ と $\sqrt{2/L}\sin kx$ についての結果を足しあわせる．

1次結合 $e^{ikx}=\cos kx+i\sin kx$ と $e^{-ikx}=\cos kx-i\sin kx$ を使おうと思うとき，$\sin kx$ と $\cos kx$ を波動関数として使うのはしばしば不便である．この箱の場合，ある与えられた k に対して2つの関数のうち1つだけ（両方ではない）が解であるので，sin か cos を使わなければならなかったのである．それらの1次結合を使えなかったのである．しかし k のわずかな相違から来るわずかな誤差を無視するものとすれば，これらの新しい1次結合から正しい結果が得られるものと期待できる．規格化するとそれらは

$$\sqrt{\frac{1}{L}}e^{ikx} \text{ と } \sqrt{\frac{1}{L}}e^{-ikx}$$

となる．波動 e^{-ikx} は波動 e^{ikx} の k を負の値で置き換えたものと考えられるから，2種の波動関数の足しあわせも含めてわれわれの新しい手続きは次のような規則となる：自由粒子の波動関数e^{ikx}を扱うために長さLのxの領域で規格化し（すなわち $\phi=\sqrt{1/L}\,e^{ikx}$ を用いる），状態についての和を k についての積分で置き換える．そのときの規則は，k と $k+dk$ 間の状態数を $Ldk/2\pi$ とし k の領域を $-\infty$ から $+\infty$ までとする．

周期的境界条件　このように正弦関数，余弦関数と指数関数との間を行き来することを以下のような議論により避けることができる．壁はいずれにせよ人工的なものであるから，遠くにあるかぎりその位置とそこでの境界条件は物理的に差を生じないはずである．したがって $x=L/2$ と $x=-L/2$ で $\phi=0$ という物理的に簡単な条件の代わりに解が直接 e^{ikx} となるような以下の2つの境界条件を使うことにしよう．それらは

$$\phi(L/2)=\phi(-L/2) \tag{4-70}$$

および

$$\phi'(L/2)=\phi'(-L/2) \tag{4-71}$$

である．

これらは**周期的境界条件**と呼ばれる．なぜなら ϕ が全空間において周期 L で x について周期的であることを要求すると，同じ条件が得られるからである．$k=2\pi n/L$ で nが正，負，0の整数であるとき，関数 $\sqrt{1/L}\,e^{ikx}$ が領域 L で規格化された解であることを容易に確かめることができる．これより上記の規則が直ちに導かれる．

3次元では3方向に L_x，L_y，L_z の辺をもつ直方体を用いたときにどうなるかを見ればよい．周期的境界条件を用いることにしよう．すなわち1つの面上のある点における波動関数の大きさと1次導関数がそれぞれ反対側の面上の対応する点における値と同じであるとする．自由粒子に対する規格化された波動関数は

$$\sqrt{\frac{1}{L_x}}e^{ik_xx}\sqrt{\frac{1}{L_y}}e^{ik_yy}\sqrt{\frac{1}{L_z}}e^{ik_zz}=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{4-72}$$

となる．ここで $V=L_xL_yL_z$ は箱の体積であり，許される k_x の値は $2\pi n_x/L_x$（n_x は整数），k_y の値は $2\pi n_y/L_y$（n_y は整数），k_z の値は $2\pi n_z/L_z$（n_z は整数）である．さらに，k_x，k_y，k_z の値がそれぞれ領域 dk_x，dk_y，dk_z に入る解の数は，

$$\frac{dk_x}{2\pi}L_x\frac{dk_y}{2\pi}L_y\frac{dk_z}{2\pi}L_z=\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}V \tag{4-73}$$

である．すなわち体積 V で規格化された平面波 $\sqrt{1/V}\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ を使えば，領域 $d^3\mathbf{k}$（$\mathbf{k}$ 空間における微分体積）の中の状態数は $Vd^3\mathbf{k}/(2\pi)^3$ である．

これを問題4-11に適用し3-1節で述べた運動量と波数との関係 $\mathbf{p}=\hbar\mathbf{k}$ を思い起こそう．(4-64) において 2 つ変更をしなければならない．第一に，$\exp(i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar)$ という波動関数を用いたが，

$$\sqrt{\frac{1}{V}}\exp(i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar)$$

とすべきであった．よって新たに $1/V$ という因子が必要である．なぜなら 2 つの波動関数の積があるからである．第二に $\sum_{\mathbf{p}}(\quad)$ という記号は $V\int\frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}(\quad)$ で置き換えなければならない．これにより4-2節で行ったことと問題4-11で与えられた結果とが正当化される．

体積因子 V は打ち消し合うべきであり実際そうなることに注意しよう．$V\to\infty$ のとき核 K は箱の大きさと独立にならなければならないのである．

数学的厳密性についての注意　体積 V が計算の最後で打ち消し合うのを見て読者は二通りの反応を示すであろう．1 つの反応は「もともと打ち消し合うべきものがなんとうまく打ち消し合うことであろうか．壁の効果はないはずなのだから」であろう．もう 1 つの反応は「どのみち影響を与えない壁などというものを持ち込んだりして，このように複雑でかつ厳密性を欠く“汚い”方法で計算するのはどうしてなのだろうか．こんなことは壁などを使わずにもっとエレガントに厳密に数学的にできるのではないか」である．このような反応の仕方は読者が物理学指向か数学指向かによる．物理学の数学的厳密性をどこにおくかについて数学者と物理学者の間に多くの誤解がある．したがって恐らくそれぞれの方法（箱か数学的厳密性か）の価値について一言述べておくべきであろう．

もちろんもっと単純な議論がある．どの方法がもっとも親しみやすいか――どの方法が新しい知識をもっとも必要としないか．箱の中の状態を数えることについて多くの物理学者は以前このような議論をしていた．

もう 1 つの点は，数学的に厳密な解が物理的に厳密でないこともあることである．すなわち箱が実際存在しうる．直方体の箱ではないかも知れないが，実験が宇宙空

間の中で行われるのはまれで，むしろ室内で行われる．壁が何の効果も与えないことは物理的にもっともであるが，本来の問題が1つの理想化として立てられたことは事実である．壁を遠く離れた鏡で置き換える代わりに壁を無限遠に移動させたときに，理想化がより満足できるものになるというものではない．壁は無限遠にあるのでないから，自由粒子という理想化では数学的厳密性が浪費されたことになる．

壁による方法は厳密であるがそれと同程度に厳密でないともいえる．いくつかの利点がある．たとえば体積 V が打ち消し合うことを見るとき，理想化された壁の少なくとも1つの側面，すなわち，壁がどれだけ遠くにあるかは重要でないということがわかる．これより，現実の環境の性質はあまり重要でないということを直観的に確信することができる．しかし実際に有限の大きさの試料を扱うとき，上で導いた公式が大変役に立つこともある．たとえば第8章で大きな直方体の物質塊の中の音波モードを求めるのにこの公式を使う．

他方，数学的に簡潔な議論の利点は打ち消し合う不必要な詳細を避けることができることである．壁の方法を使うと，壁がどのようにして効果をもたなくなるのかについて何らかの理解が得られるが，とにかく壁の効果がなくなることは確かである．それゆえにそれを再度確かめるために詳細にのめりこむことはしない．

規格化の問題は特別な例であるが，これは問題点をよく示している．理想化された物理の問題を解くときの数学者の神経の使い方を物理学者は理解できない．物理学者は実際の問題がもっと複雑であることを知っている．直観により重要でないところを省き，残った部分にも近似を行うことにより，問題をすでに単純化しているのである．

第5章　観測と演算子

これまで位置と時間の座標のみを測定することを目的としているかのように量子力学系を記述してきた．たしかに量子力学系の測定はすべて事実上位置と時間の測定に還元されるであろう(たとえばメーターの針の位置や粒子の飛行時間)．この可能性により，位置の測定について定式化された理論はあらゆる現象を記述するのに原理的には十分である．しかし装置に究極的に記録されるものが位置の測定であるということにこだわらず，たとえば，運動量の測定に関わる問題に直接答えてみることは有用である．その際，運動量を位置のデータに変換する装置を詳しく解析することをしない．したがってこの章では粒子が特定の位置をもつ振幅について論じる代わりに，特定の運動量，エネルギーなどの物理量を見出す振幅の概念を発展させる．

この章の第1節で，運動量とエネルギーによって系がどのように記述されるかを述べる．ここで学ぶ概念は，第2節でさらに拡張されて量子力学系を表現するさまざまな一般的方法を述べるために用いられる．ある表示方法から他の表示方法への変換を可能にする変換関数は多くのおもしろい性質をもっている．それらのうちの1つは演算子の概念である．これは前の章で導入されたが，この章の第3節でさらに議論する．

5-1　運動量表示

運動量振幅　これまで粒子の位置によって確率の概念を表してきた．しかしここで運動量を測定することを考える．運動量の測定によって粒子が運動量 p をもつことが観測される確率 $P(p)$ を，ある振幅 $\phi(p)$ の絶対値の2乗として表すことができるであろうか．実際，そのような振幅が存在し，容易に求めることができる．

運動量（または他の物理量）を測定する方法のいくつかは位置の測定に対応する．したがって座標測定の方法を知っていれば解析できる．たとえば，1次元の場合，$t=0$ で粒子の位置が x 軸の原点から $\pm b$ の範囲に局在しているものとする．不確定性 b はいくらでも大きくできるが，有限であるとする．そのような粒子の運動量は

飛行時間法によって測定される．すなわち時刻 $t=T$ までに粒子がどれだけ遠くに進んだか（外力はないものと仮定する）を観測する．位置が x ならば，速度は x/T であり，運動量は $p=mx/T$ である．T を十分大きくすることにより，このような運動量測定の誤差 $\pm mb/T$ を任意に小さくすることができる．

このような実験で定義される運動量の確率 $P(p)$ を解析することにしよう．運動量が p と $p+dp$ の間にある確率 $P(p)dp$ は，粒子に影響を及ぼしているポテンシャルがすべて急になくなったとしたときに時刻 T 後に粒子が x と $x+dx$ の間に存在する確率 $P(x)dx$ と等しい．もちろんそのために p と x が $p=mx/T$ で結ばれていることが必要である．時刻 $t=0$ における粒子の波動関数が $f(x)$ で与えられていると仮定すると，問題は直接 $f(x)$ を用いて $P(p)$ を表すことである．

時刻 T に粒子が x に到達する振幅は

$$\psi(x, T)=\int_{-\infty}^{\infty} dy K_0(x, T; y, 0)f(y) \tag{5-1}$$

である．自由粒子の核 K_0 に具体的な形（3-3）を代入すると上の式は

$$\psi(x, T)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T}}\exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar T}\right)\int_{-\infty}^{\infty} dy\exp\left(\frac{-imxy}{\hbar T}\right)\exp\left(\frac{imy^2}{2\hbar T}\right)f(y) \tag{5-2}$$

となる．

この振幅の絶対値の2乗は粒子が x と $x+dx$ の間に存在する確率を与える．われわれの定義によれば，これは粒子の運動量が p と $p+dp$ の間にある確率と等しい（$T\to\infty$ の極限で）．

$$\begin{aligned}P(x)dx&=\frac{m}{2\pi\hbar T}\left|\int_{-\infty}^{\infty} dy\exp\left[\frac{im}{2\hbar T}(y^2-2xy)\right]f(y)\right|^2 dx\\&=P(p)dp \qquad [T\to\infty]\end{aligned} \tag{5-3}$$

$p=mx/T$ を代入し T の大きい極限をとれば，次の結果が得られる．

$$P(p)dp=\frac{dp}{2\pi\hbar}\left|\int_{-\infty}^{\infty} dy\exp\left(\frac{imy^2}{2\hbar T}-\frac{ipy}{\hbar}\right)f(y)\right|^2 \tag{5-4}$$

前に仮定したのは初期に粒子が原点のまわりの $\pm b$ 内の領域に局在しているということであった．これは y の絶対値が b よりも大きいところで初期波動関数 $f(y)$ が0となることを意味する．T が大きくなるにつれて $imb^2/2\hbar T$ は無視できるほどに小さくなる．y の絶対値が b よりも大きいところからは（5-4）の積分に対する寄与がないので，確率 $P(p)dp$ は $dp/2\pi\hbar$ に振幅*)

$$\phi(p)=\int_{-\infty}^{\infty} dy\exp\left(\frac{-ipy}{\hbar}\right)f(y) \tag{5-5}$$

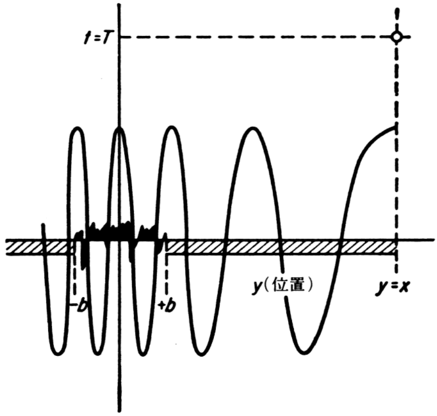


図5-1　自由に運動する粒子が時間 T の後に位置 x に到達する振幅は，2つの関数の積によって決まる．第一の関数は，粒子がある位置 y から出発するという振幅 $f(y)$ である．これは図の中で陰をつけた曲線で表してある．第二の関数は，y から x に到達する振幅で，自由粒子の核 $K(x, T;y, 0)$ である．これは図の中で波数がゆっくり変動する正弦関数で表されている．[ここで，y は変数であるから，終りの位置 x を関数 K の原点として扱っている.] $-b$ と b の間で $f(y)$ が0でないものとして，x が原点から b よりももっと離れている場合，波動は近似的に一定の波長をもつ．その近似的な形は $\exp[(-i/\hbar)(mx/T)y]$ である．2つの関数の積をとり，y について積分すると，到達する振幅が最終的に得られる．すべての粒子が同じ時間 T の後に近似的に同じ距離 x（$x \gg b$ を仮定する）だけ動くから，この最終的な振幅は粒子が運動量 $p=mx/T$ をもつ振幅と同じである．

の絶対値の2乗を掛けたものに近づく．この結果についての別の説明は図5-1に与えられていて，図5-2で拡張されている．

(5-5) に与えられている運動量振幅の表式は1次元の場合に適用されるものであるが，この定義を3次元の場合に拡張するのは容易で，この場合振幅は

$$\phi(\mathbf{p})=\int d^3\mathbf{r}\,\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})\right]f(\mathbf{r}) \tag{5-6}$$

となる．ここで波動関数 $f(\mathbf{r})$ は3次元座標空間内のすべての点で定義されているものとする．$\phi(\mathbf{p})$ は粒子が $t=0$ で運動量 $\mathbf{p}$ をもつ振幅である（これが時刻 $t=T$ に対して定義されて**いない**ことに注意．時間間隔 T は測定手段の一部であり，運動量振

＊）　$\phi(p)$ の定義の中に $1/\sqrt{2\pi\hbar}$ という因子を含める書き方も多く見られる．しかし，4-3節で述べてきたことに従って，ここでは，われわれの書き方を用いる．運動量空間の微分要素には $1/2\pi\hbar$ という因子が各次元ごとに現れるからである．たとえば，3次元運動量空間の微分要素は $d^3\mathbf{p}/(2\pi\hbar)^3$ である．

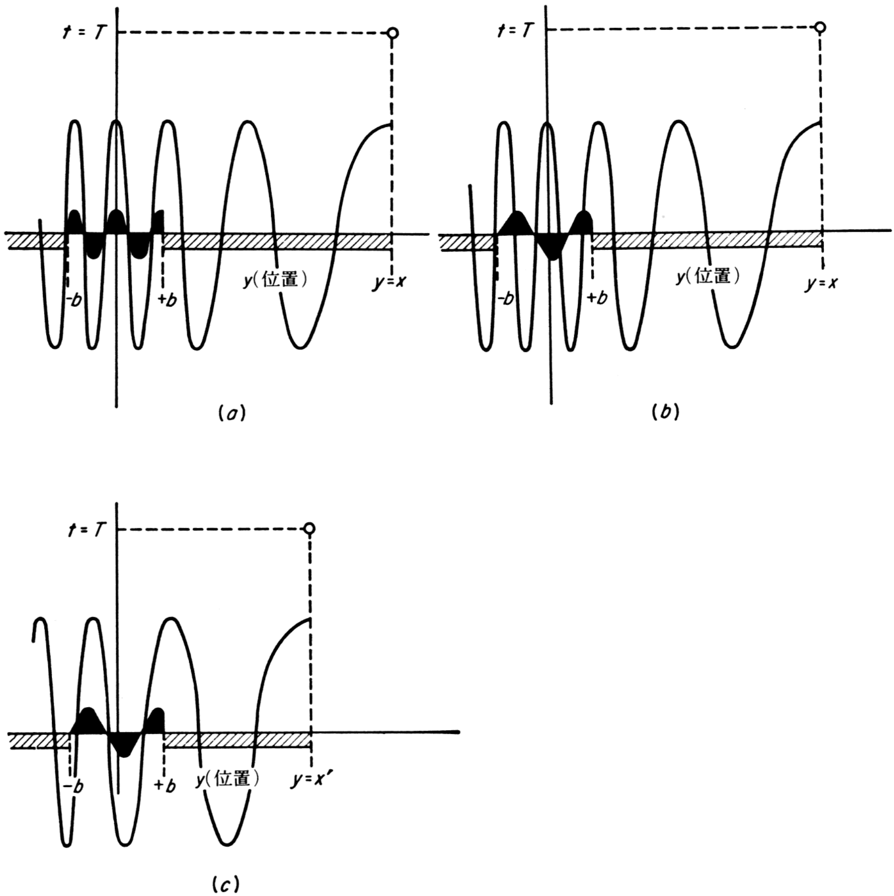


図5-2　図(a) のように，振幅 $f(y)$ が自由粒子の核 $K(x, T\,;\,y, 0)$ とほぼ同じ波長をもつならば，これら 2 つの関数の積の積分は非常に大きくなる．すなわち，運動量が $p=mx/T$ となる確率は非常に大きい．

他方，図(b)に示すようにある別の関数 $f'(y)$ の場合，波長が異なるものとしよう．このとき，積をとると，異なる y の値からくる積分の寄与は互いに打ち消し合う．この場合，運動量が mx/T となる確率は小さい．

図(c)に示すように，別の位置 x' を終点として選ぶとする．すると核の曲線の別の部分が $[-b,\ +b]$ の区間と重なりあう．x' をうまく選ぶと，この部分の核の波長と $f'(y)$ の波長とが同じになり，確率は大きくなる．すなわち，このような粒子が新しい運動量値 $p=mx'/T$ をもつ確率が大きいのである．

幅を変えることなく T を変化させることができる)．この振幅の絶対値の 2 乗に運動量の微分要素を掛けたものは運動量空間の中の（3 次元）区間 $d^3\mathbf{p}/(2\pi\hbar)^3$ に運動量を見出す確率を与える．

これまで飛行時間法に基づく運動量測定を解析してきた．しかしながらそのような解析は他の測定方法にも適用できる．運動量測定のどの方法を解析しても運動量振幅について同じ結果が得られる．同じ物理量，すなわち運動量の測定のための 2 つの方法（あるいは技術）を考えよう．もし一方の方法が他方の方法とは別の結果を与えるならば，どちらかの装置が不完全である理由を説明しなければならない．したがって飛行時間法が運動量測定を定義する適切な方法であると認めるならば，系が状態 $f(y)$ にある場合，運動量を測定する他のすべての装置は運動量分布について同じ結果を与えなければならない．運動量を測定する装置の解析はいずれも運動量 p の振幅について同じ表式 $\phi(p)$ を与えなければならない．ただし本質的でない一定の位相差の不定性が残る［δ 一定として因子 $\exp(i\delta)$］．例として次の問題を考えよう．

問題 5 - 1　古典近似によって運動量を測定するように設計された実験装置（たとえば磁場による分析器）を考えよ．上で述べた方法により装置を解析せよ．運動量振幅について同じ結果が得られることを示せ．

運動量表示への変換　時刻 t において粒子が位置 $\mathbf{R}$ に存在する振幅を $\psi(\mathbf{R}, t)$ と表した．運動量振幅が

$$\phi(\mathbf{p}, t)=\int d^3\mathbf{R}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{R})\right]\psi(\mathbf{R}, t) \tag{5-7}$$

で与えられることを見た．これを，時刻 t において粒子が運動量 $\mathbf{p}$ をもつ振幅と呼ぶことにしよう．

問題を座標表示よりも運動量表示で解析する（すなわち座標空間よりも運動量空間で解析する）ことが有用であることがしばしば起こる．実際，一方の表示から他方の表示への変換はフーリエ変換そのものである．したがって運動量表示が与えられていて座標表示を求めたいならば次のような逆変換を行う．

$$\psi(\mathbf{R}, t)=\int\frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{R})\right]\phi(\mathbf{p}, t) \tag{5-8}$$

他の振幅の構造を記述するのに用いたのと同じ物理的描像により，公式 (5-8) を

記述することができる．すなわち粒子が位置$\mathbf{R}$に存在する振幅は選択肢の和として与えられる．この場合選択肢は2つの項の積に対応する．1つは粒子の運動量が$\mathbf{p}$である振幅$\phi(\mathbf{p})$である．もう1つの項，$\exp(i\mathbf{p}\cdot\mathbf{R}/\hbar)$ は**運動量が$\mathbf{p}$であるときに粒子が位置$\mathbf{R}$に存在する振幅である．**この因子はここで初めて登場してきたのではなくすでに問題3-4でこのような表式を議論した．

(5-7)の変換において指数部分が負の符号をもっていることに注意しよう．このような項は前の段落と並行したやりかたで意味づけられる．すなわち，$\exp(-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{R}/\hbar)$ **は粒子が位置$\mathbf{R}$にあるときに運動量$\mathbf{p}$をもつ振幅であるということができる．**

運動量表示における核　途中の時刻の運動を記述する核を用いて時刻t_1の波動関数から後の時刻t_2における波動関数を導く方法を3-4節で示した．それによれば

$$\psi(\mathbf{R}_2, t_2)=\int d^3\mathbf{R}_1\ K(\mathbf{R}_2, t_2\,;\,\mathbf{R}_1, t_1)\psi(\mathbf{R}_1, t_1) \tag{5-9}$$

となる．これと並行した表式で運動量空間における核を定義することができる．すなわち時刻t_2における運動量振幅はそれ以前の時刻t_1における運動量振幅から次のように導かれる．

$$\phi(\mathbf{p}_2, t_2)=\int\frac{d^3\mathbf{p}_1}{(2\pi\hbar)^3}\ \mathcal{K}(\mathbf{p}_2, t_2\,;\,\mathbf{p}_1, t_1)\phi(\mathbf{p}_1, t) \tag{5-10}$$

(5-9)の$\psi(\mathbf{R}_1, t_1)$に(5-8)の表式を代入し，$\psi(\mathbf{R}_2, t_2)$のフーリエ変換をとり(5-7)のように$\phi(\mathbf{p}_2, t_2)$を求めると，運動量表示における核が座標表示における核を用いて

$$\mathcal{K}(\mathbf{p}_2, t_2\,;\,\mathbf{p}_1, t_1)=\int d^3\mathbf{R}_1\int d^3\mathbf{R}_2 e^{-(i/\hbar)[(\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{R}_2)-(\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{R}_1)]}K(\mathbf{R}_2, t_2\,;\,\mathbf{R}_1, t_1) \tag{5-11}$$

と表されることがわかる．

たとえば，自由粒子の運動を記述する核は運動量空間において

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_0(\mathbf{p}_2, t_2\,;\,\mathbf{p}_1, t_1)&=\int d^3\mathbf{R}_1\int d^3\mathbf{R}_2 e^{-(i/\hbar)[(\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{R}_2)-(\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{R}_1)]}K_0(\mathbf{R}_2, t_2\,;\,\mathbf{R}_1, t_1)\\&=\begin{cases}(2\pi\hbar)^3\delta(\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2)\exp\left[-\dfrac{i|\mathbf{p}_1|^2}{2\hbar m}(t_2-t_1)\right] & t_2>t_1\\0 \qquad t_2<t_1\end{cases}\end{aligned} \tag{5-12}$$

である．［最後の式は(4-28)の約束に従った．］この中にデルタ関数が現れているのは自由粒子の運動量が変化しないことを示している［図5-3を見よ］．しかしながら運動量波動関数の位相は因子$\exp(-iEt/\hbar)$ $[E=p^2/2m]$に従って連続的に変化する．(5-12)の結果は(4-64)からも直接導かれる．

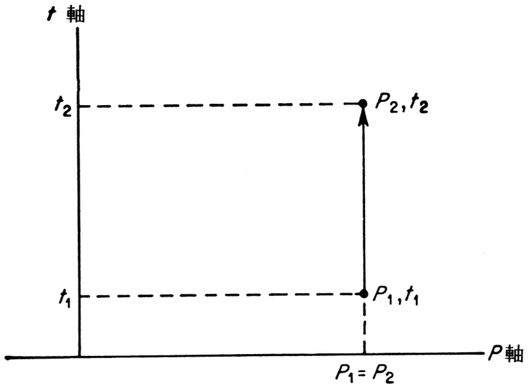


図5-3　運動量空間における自由粒子核は座標空間における核と異なる振る舞いをする．運動量空間では，時刻 t_2 に粒子が運動量 p_2 をもつようになる経路はただ 1 つしかない．この唯一の経路は，初めに $p_1=p_2$ で出発しなければならない．他のいかなる経路も核に寄与しない．

この後者の核は自由粒子の表示として座標空間の核よりも簡単な形である．一般的に粒子が自由でなくポテンシャルの影響の下に運動する場合，運動量表示の核は単純でなくなる．しかしポテンシャルの効果が摂動展開で表されるとき，この単純さは保持される（第 6 章）．

エネルギー-時間変換　多くの応用において，特に相対論的量子力学において空間と時間の変数を対称的に扱うのがよい．このとき座標表示から運動量表示に変換する際に時間からエネルギーへの変換も含める．したがって核の変換を全部行うと，

$$k(\mathbf{p}_2, E_2 ; \mathbf{p}_1, E_1)=\int d^3\mathbf{R}_1\int d^3\mathbf{R}_2\int_{-\infty}^{\infty}dt_1 \times\int_{t_1}^{\infty}dt_2\ e^{-(i/\hbar)[(\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{R}_2)-(\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{R}_1)]}e^{(i/\hbar)(E_2t_2-E_1t_1)}K(\mathbf{R}_2, t_2 ; \mathbf{R}_1, t_1) \qquad (5\text{-}13)$$

となる．エネルギー E は $p^2/2m$ に等しいのでなく核を定義するのに必要な独立変数（時間の係数）である．系が無限大の時間同じエネルギー状態に留まるならば，E の厳密な測定が可能となりエネルギーと運動量の間に関係が成り立つ．

1 つの例として，自由粒子の核を調べてみよう．この場合，$\mathbf{R}_1$ と $\mathbf{R}_2$ についての積分はすでに行われており結果が(5-12)に与えられている．したがってあとは t_1 と

t_2 についての積分を行えばよい．$t_2=t_1+\tau$ とおくと二重積分は

$$\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\ e^{(i/\hbar)(E_2-E_1)t_1}\int_0^{\infty}d\tau\ e^{(i/\hbar)(E_2-p^2/2m)\tau} \tag{5-14}$$

と表される．

2 つの積分のうち第一のものはデルタ関数の表示であり，$2\pi\hbar\delta(E_2-E_1)$ である．第二の積分は

$$\int_0^{\infty}d\tau e^{i\omega\tau} \tag{5-15}$$

という形をしている．この後者の積分は量子力学の問題にしばしば登場する．ω が実数の場合積分は収束しない．今の計算を実行するために ω を複素数 $\omega+i\varepsilon$ で置き換える．ω と ε がともに実数ならば，積分は $i/(\omega+i\varepsilon)$ という値になる．

ε が 0 に近づくときのこの分数の極限をとり，その結果は単純に i/ω であると解釈することが可能と思われるかも知れない．しかしそのような解釈は後の計算で正しくない（というより不完全な）結果を与える．ここで評価しようとしている関数は 1 つの核であり後の計算において ω またはそれと等価の量について（他の関数を掛けた後）積分することがしばしばである．ε が式から落とされると積分は $\omega=0$ で極をもつのでわれわれはどうしたらよいかわからなくなる．

そのような極で積分の主値だけをとるのは正しくないであろう．これは間違った結果を与えるであろう．したがって，特に，核の逆変換が初めの座標表示の核を与えないということになる．すなわち，負の時刻において 0 とならないという意味でこのような変換は正しい核を与えない．このような積分から正しい結果を得る方法は，実軸から無限小の距離のところに極を移すことである．これは展開式に ε を残すことにより実現される．

分数の分母を

$$\frac{i}{\omega+i\varepsilon}=\frac{i(\omega-i\varepsilon)}{\omega^2+\varepsilon^2}=\frac{i\omega}{\omega^2+\varepsilon^2}+\frac{\varepsilon}{\omega^2+\varepsilon^2} \tag{5-16}$$

のように実数化すると，右辺の第 1 項は i/ω と解釈することができ，後の ω についての積分において，この積分の主値(principal part，以下P.P.と略記する）を用いることができる．ε が 0 に近づくとき，第 2 項は $\pi\delta(\omega)$ となるので，後の積分においてもこのように解釈される．すなわち，もっと精密な数学的定義が必要な場合，$i/(\omega+i\varepsilon)$ は P.P.$(i/\omega)+\pi\delta(\omega)$ で置き換える．すなわち

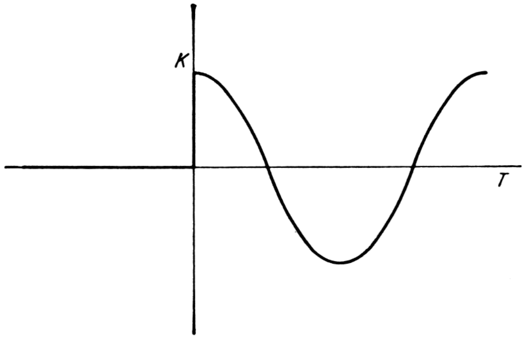


図5-4　自由粒子核 $\mathcal{K}_0$ の実数部分を時間の関数として図示する．負の時刻において核は0であり，$t=0$ において急激な飛躍をして出発する．そして，一定の振幅と振動数をもつ余弦関数として持続する．

$$\int_0^\infty d\tau e^{i\omega\tau}=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{i}{\omega+i\varepsilon}=\text{P.P.}\left(\frac{i}{\omega}\right)+\pi\delta(\omega) \tag{5-17}$$

である．ε を含むすべての表式において，$\varepsilon\to 0$ の極限をとるものとする．

核の評価に戻ると，ω を $E_2-p^2/2m$ で置き換えると

$$k_0(\mathbf{p}_2, E_2\,;\,\mathbf{p}_1, E_1)=(2\pi\hbar)^4\delta^3(\mathbf{p}_2-\mathbf{p}_1)\delta(E_2-E_1)i\left(E_1-\frac{p_1^2}{2m}+i\varepsilon\right)^{-1} \tag{5-18}$$

が得られる．この式にデルタ関数が存在することから，自由粒子の運動の間エネルギー E も運動量 $\mathbf{p}$ も変化しないことがわかる．この式の最後の項に示されているように，これら2つの量は粒子の運動を決める．すなわちエネルギー E と運動量 $\mathbf{p}$ をもつ自由粒子がある位置から他の位置に運動する振幅は $i(E-p^2/2m+i\varepsilon)^{-1}$ に比例する．

この節の初めに，エネルギー E は一般に $p^2/2m$ と等しくなく別の変数であると述べた．この区別を理解するため，自由粒子の核を見てみよう．これは時間空間について波動の形をした関数で，E は時間の係数であり振動数に比例する．この核は(5-12)で与えられていて図5-4に示されている形をしている．ここで核は時間差 $T=t_2-t_1$ の関数として表されている．

T が0より小さいとき $\mathcal{K}_0=0$ であり，$T=0$ で急に振動を始める．時間表示からエネルギー表示への変換はフーリエ変換と等価である．波は急激に始まるので（$T=0$ において），フーリエ変換はすべての振動数すなわちすべてのエネルギーの成分

を含む．関数が長い時間間隔（多くの周期）に拡がっている場合，フーリエ変換において１つの振動数が支配的となる．自由粒子の場合，この支配的な振動数がエネルギー$E_0=p^2/2m$に対応する．

上記の理由により，自由粒子の核は次のような因子をもつ．

$$\frac{i}{E_1-p_1^2/2m+i\varepsilon}=\mathrm{P.P.}\left(\frac{i}{E_1-p^2/2m}\right)+\pi\delta\left(E_1-\frac{p^2}{2m}\right) \tag{5-19}$$

ここで右辺の第１項は$T=0$における急激な立ち上がりによる過渡効果を表す．第２項は定常的振る舞いを与え，十分長く待ったときに見出すことができる唯一のエネルギーが，通常の$p^2/2m$であることを示している．しかし$T=0$の近くでエネルギーはこの古典的式で与えられない．

問題５-２　空間については変換しないで時間についてのみ変換して核を次のように定義する．

$$k(x_2, E_2\,;\,x_1, E_1)=\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\int_{t_1}^{\infty}dt_2\;\; e^{(i/\hbar)(E_2t_2-E_1t_1)}K(x_2, t_2\,;\,x_1, t_1) \tag{5-20}$$

このとき時間に依存しないハミルトニアンHをもつ系に対して

$$k(x_2, E_2\,;\,x_1, E_1)=2\pi\hbar i\delta(E_2-E_1)\sum_m\frac{\phi_m(x_2)\phi_m^*(x_1)}{E_1-E_m+i\varepsilon} \tag{5-21}$$

となることを示せ．ここでϕ_mとE_mはHの固有関数と固有値である．(4-59)を参照．

５-２　量子力学変数の測定

特性関数　前節で，運動量を測定するための実験によってどのように運動量の確率分布が定義されるかを示した．すなわち，正しく計画された実験の結果から次のような問いに答えることができる．粒子の運動量が$\mathbf{p}$である確率はなにか．運動量の確率関数が存在することを用いて，運動量変数によって表される波動関数（振幅）を導くことができた．実際，以前用いた空間時間表示と同様に運動量エネルギー表示によっても系を完全に記述することができ，また問題を完全に解析することができることを示した．

このような結果は運動量以外の物理量についてもあてはまる．実験によってある物理量が測定されるものとするとそれには確率関数が付随する．すなわちある実験によってある系に付随した特性A（たとえば，運動量のx成分）を測定できるものとすると，実験をくりかえして後に確率関数$P(a)$を構成することが可能である．こ

れはある特定の実験で A の数値が a と等しくなる確率を与える．

一般に確率振幅をこのような確率関数と結び付けることが可能である．この振幅は，測定される変数と，系を完全に特定するために必要な変数とによって定義される．運動量測定の例を一般化する場合に必要なことを見てみよう．その系が G という性質をもつかどうかを問うものとする．たとえば，G は次のような命題であるとしよう：物理量 A の値は a である．この問いに実験的に答える方法があるはずである．ある実験装置を考える．粒子は G という性質をもつときその装置を通り抜けてスクリーンや計測器のある位置に到達するものとする．

$f(x)$ が測定すべき系の波動関数で，$K_{\mathrm{exp}}(\zeta, x)$ が特定の実験装置を通過する振幅であり，ζ が G という性質をもつ粒子の到達する位置であるとき，この確率は

$$P(G)=\left|\int dx\ K_{\mathrm{exp}}(\zeta, x) f(x)\right|^2 \tag{5-22}$$

となる．この確率は別の数式で表すこともできる．

$$P(G)=\left|\int dx\ g^*(x) f(x)\right|^2 \tag{5-23}$$

ここで

$$g^*(x)=K_{\mathrm{exp}}(\zeta, x) \tag{5-24}$$

とおいた（後に述べるように，これをある関数の複素共役として定義したのは便宜上である）．したがって関数

$$\psi(G)=\int dx\ g^*(x) f(x) \tag{5-25}$$

は系が性質 G をもつ振幅である．この概念は図5-5で詳しく示されている．

この性質 G は次の理由により関数 $g^*(x)$ によって定義される．同じ性質を測定するのに，違う装置による実験をするものとしよう．すなわち異なる核 $K_{\mathrm{exp}'}(\eta, x)$ を用いるものとする．この第二の実験で粒子は位置 η に到達する．系が性質 G をもつ確率は

$$\left|\int dx K_{\mathrm{exp}'}(\eta, x) f(x)\right|^2 \text{ または } \left|\int dx g'^*(x) f(x)\right|^2 \tag{5-26}$$

である．

測定される性質は同じであるから，前の実験と同様，いずれの場合も $P(G)$ について同じ結果が得られなければならない．換言すれば，任意の関数 $f(x)$ に対して

$$\left|\int dx g'^*(x) f(x)\right|^2=\left|\int dx g^*(x) f(x)\right|^2 \tag{5-27}$$

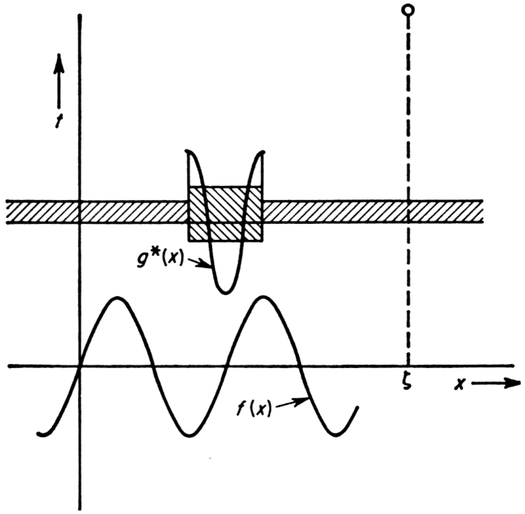


図5-5 性質 G を測定するように工夫された装置を，入射粒子［波動関数 $f(x)$］の始点と終点 $x=\zeta$ の間におく．この装置は運動の核に変更を加え(図5-1と図5-2を比較せよ)，$g(x)$ に等しくする．積 $f(x)g(x)^*$ を x について積分すると，装置を通過して ζ に到達する振幅が得られる．

が成り立たなければならない．これは重要でない定数位相因子 $\exp(i\delta)$ を除いて，$g^*(x)=g'^*(x)$ であることを意味する．すなわち同じ性質を決める方法はすべて同じ(位相を除いて)関数 $g^*(x)$ に対応する．この理由により $g^*(x)$ を性質 G の**特性関数**と呼ぶ．

別の疑問を問うことにしよう．性質 G をもつことが確かであるためには，状態 $f(x)$ はどのようなものでなければならないか(たとえば，運動量が確定している粒子の波動関数はなにか)．すなわち，装置を通り抜ける粒子が確実に位置 ζ に到達し他の位置 ζ' には到達しないようなある関数 $f(x)$，たとえば $F(x)$ を求めたい．ζ' に到達する振幅は $\delta(\zeta-\zeta')$ に比例する［すなわち $\zeta'=\zeta$ でなければ 0］．したがって

$$\int dx\ K_{\mathrm{exp}}(\zeta', x)F(x)=\delta(\zeta-\zeta'). \tag{5-28}$$

核の複素共役とその逆数との関係から 4-1 節で示したようにこれを解くことができる．(4-37) より

$$\int dx\ K_{\mathrm{exp}}(\zeta', x)K^*_{\mathrm{exp}}(\zeta, x)=\delta(\zeta-\zeta') \tag{5-29}$$

が得られ

$$F(x)=K^*_{\exp}(\zeta,x)=g(x) \tag{5-30}$$

となる．すなわち $g(x)$ は確実に性質 G をもつ粒子の波動関数である．次の2つの言い方が可能である．(1)粒子が性質 G をもつ，あるいは(2)粒子は状態 $g(x)$ にある．したがって明らかになったことは，粒子が状態 $f(x)$ にあるとき，状態 $g(x)$ に存在する振幅は

$$\psi(G)=\int dx\, g^*(x)f(x)=\Phi[g(x)] \tag{5-31}$$

であるということである．多次元の場合，x は多変数の空間となる．

おおよそ次のようにいうことができる．粒子が状態 $g(x)$ に存在する確率は $\left|\int g^*(x)f(x)dx\right|^2$ である．この命題の意味を理解しているならばこれでよい．系は状態 $f(x)$ にあるのであって，$g(x)$ にあるのではない．系が状態 $g(x)$ にも存在するかどうかを測定するならば，その結果は

$$P(G)=\left|\int_{-\infty}^{\infty}dx\ \ g^*(x)f(x)\right|^2=\wp[g(x)] \tag{5-32}$$

という確率で肯定的である．

状態が $g(x)$ であるかを問う測定では波動関数が実際 $g(x)$ ならば，その測定結果は常に肯定的である．他のすべての波動関数については，実験をくりかえした場合，多数の試行のある割合 P（0と1の間）について，肯定的結果となる．これは量子力学の確率論的解釈からくる中心的結果である．

このことについて，波動関数とその複素共役について興味ある逆の関係を導くことができる．(5-25)の解釈に従うと，$g^*(x)$ は系が位置 x にあるときに性質 G をもつ振幅である．［この命題は(5-31)の $f(x)$ にデルタ関数を代入することにより数学的に表現することができる．］他方，$g(x)$ は系が性質 G をもつとき位置 x にある振幅である（これは正に波動関数の定義を与えている）．一方の関数は A ならば B であるという振幅を与え，他方の関数は B ならば A という振幅を与える．逆は単に複素共役をとるだけでよい．

(5-31) は次のように解釈される．系が性質 G をもつ振幅は，系が x にある振幅 $f(x)$ に，系が x にあるとき性質 G をもつ振幅 $g^*(x)$ を掛けて，選択肢 x について和をとったものである．

問題 5 - 3　波動関数 $f(x)$ の粒子が x と $x+dx$ の間に存在する確率 $\int f^*(x)f(x)dx$ が 1 に規格化されているとする．この拘束条件の下で性質 G をもつ確率が最大となる状態 $f(x)$ は $g(x)$ であることを示せ．

問題 5 - 4　時刻 t_1 において系の波動関数が $\psi(x_1)$ であるとする．また時間区間 $t_2 \geqq t \geqq t_1$ における運動に対して，系の振る舞いは核 $K(x_2, t_2 ; x_1, t_1)$ によって記述されるものとする．時刻 t_2 において系が状態 $\chi(x)$ に見出される確率は，次の積分の絶対値の 2 乗で与えられることを示せ．

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \ \ \chi^*(x_2)K(x_2, t_2 ; x_1, t_1)\psi(x_1)$$

この積分を状態 $\psi(x)$ から $\chi(x)$ への**遷移振幅**と呼ぶ．

多変数の測定　前節の考察において，理想的な実験を仮定した．すなわち A 以外の量を同時に測定できないということであった．2 つ以上の $g(x)$ が同じ結果を与えることはないものとし，物理量 A の測定により系について最大限可能な情報量を得るものとした．

しかし実際にはいくつかの変数が系の状態を決めるというのが普通である．たとえば，3 次元の系で運動量の x 成分だけが測定されるならば，$g(x)$ を特定することはできない．2 つの波動関数 $\exp(ip_x x/\hbar)$ と $\exp(ip_x x/\hbar - ip_y y/\hbar)$ はともに運動量の x 成分について同じ値 p_x を与える．したがって 3 次元系で p_x のみが測定される場合，粒子は y 方向に運動量の任意の y 成分をもって運動しかつ測定結果に変更を生じない．測定装置の特殊な場所に粒子がくる必要もない．ある線上やある点の集合上に到達する粒子はすべて同じ p_x の値をもつ．

したがって一般に波動関数 $g(x)$ によって性質 G は次のように定義される．波動関数 $g(x)$ で記述される状態はたしかに性質 G をもつ．しかしながら，その逆は必ずしも正しくない．すなわち，性質 G をもつ状態がすべて同じ波動関数 $g(x)$ で記述されるということは確かでない．G が，同時に測定可能なあらゆる物理量の特定を意味しているときにかぎり，波数関数は G によって完全に定義される．そのときでも不定の（重要でない）定数位相因子 $\exp(i\delta)$ が残る．

理想的実験が多変数の測定を必要とするとき，特性関数 $g^*(x)$ を必要性に応じて拡張することは容易にできる．物理量がいくつかありこれらを A，B，C，…と呼ぶことにしよう．そしてそれらは 1 つの実験で同時に測定可能な量であるとする．た

とえば，運動量の x 成分，y 成分などである．これらの物理量に a，b，c，…などの数値を与えることにより系の状態が完全に記述できるものとする．すなわち，状態がある性質をもつか否かを定めることによりその状態を完全に記述する．この場合の性質というのは，A の値が a であるとか B の値が b であるとかということである．さらに，他の情報（A，B などの数値の知識からは導きだせない情報）はいかなる方法によっても同時には得られないものとする．

これらすべての物理量を測定することのできる実験装置（すなわち A の値は a である等の性質を系の状態がもっているか否かを決める実験装置）があるものとする．そのような性質の特性関数を次のように表そう．

$$g^*(x)=\chi^*_{a,b,c,\cdots}(x) \tag{5-33}$$

この関数はもちろん実験で測定される数値 a，b，c，…と座標変数 x の関数である．

系が状態 $f(x)$ にあるものとしよう．このとき実験の結果 A の値が a，B の値が b 等となる確率（すなわち，状態が問題としている性質をもつ確率）は，

$$P(a, b, c, \cdots)=\left|\int dx\ \chi^*_{a,b,c,\cdots}(x)f(x)\right|^2 \tag{5-34}$$

である．

変換関数　系が実際に状態 $\chi_{a',b',c'\cdots}(x)$ にあるとする．すなわち，A の値は a'，…であるとする．このとき，実験で系が a，b，c，…で表現される状態に見出される確率は $a=a'$，$b=b'$，$c=c'$，…でないかぎり 0 である．これは規格化因子を適当に選ぶことにより

$$\int dx\ \chi^*_{a,b,c,\cdots}(x)\chi_{a',b',c',\cdots}(x)=\delta(a-a')\delta(b-b')\delta(c-c') \tag{5-35}$$

となることを意味する．

関数 $\chi_{a,b,c,\cdots}(x)$ は系が a，b，c，…で記述される状態にあるとき x において見出される振幅である．関数 $\chi^*_{a,b,c,\cdots}(x)$ は特性関数と呼ばれ，系が x にあるとき a，b，c，…によって特定される状態に見出される振幅である．

系が状態 $f(x)$ にあることがわかっているとき，

$$F_{a,b,c,\cdots}=\int dx\ \chi^*_{a,b,c,\cdots}(x)f(x) \tag{5-36}$$

は A の値 a，B の値 b 等によって特定される状態に系を見出す振幅である．

$F_{a,b,c,\cdots}$ は関数$f(x)$と同じくらいに系の状態をよく表現している．実際，関数$F_{a,b,c,\cdots}$がわかれば，逆変換により関数$f(x)$を再現することができる．

関数$F_{a,b,c,\cdots}$は状態の「A，B，C，…表示」と呼ばれる（前節では運動量表示でこの１例を示した）．関数$f(x)$は状態についての通常の座標表示，すなわち「x表示」である．２つの表示の間の変換は関数χとχ^*を使って行われる．特に，関数$\chi^*_{a,b,c,\cdots}(x)$はx表示からA，B，C，…表示に移すために必要な変換関数である．一方，関数$\chi_{a,b,c,\cdots}(x)$は逆方向に移すために必要な変換関数である．すなわち（5-36）の変換の逆は

$$f(x)=\sum_a \sum_b \sum_c \cdots F_{a,b,c,\cdots}\chi_{a,b,c,\cdots}(x) \tag{5-37}$$

である．換言すればxに見出される振幅は$A=a$，$B=b$，…の状態に見出される振幅$F_{a,b,c,\cdots}$に，$A=a$，$B=b$，…のときxに見出される振幅$\chi_{a,b,c,\cdots}(x)$を掛けて，選択肢a，b，c，…について和をとったものである．

問題 5-5　関数$f(x)$が

$$f(x)=\sum_a \sum_b \sum_c \cdots F'_{a,b,c,\cdots}\chi_{a,b,c,\cdots}(x) \tag{5-38}$$

によって表されているものとする．この関係式を（5-36）に代入し（5-35）で定義されているようなχの直交性を用いて，$F'_{a,b,c,\cdots}=F_{a,b,c,\cdots}$であることを示せ．

問題 5-6　A，B，C，が直交座標系の運動量成分p_x，p_y，p_zであるとする．関数$\chi_{a,b,c}(x,y,z)$の形はどのようなものか．5-2 節の結果を用いて5-1 節で得られた関係式を確かめよ．

問題 5-7　A，B，C，…表示が座標表示にも運動量表示にも対応していなくて，系の状態を表示する第３の方法であるものとする．座標表示とA，B，C，…表示との間を変換するのに必要な関数$\chi_{a,b,c,\cdots}(x)$が知られているものとする．さらに座標表示と運動量表示の間で必要な変換関数も知られているものとする．このとき運動量表示とA，B，C，…表示との間の変換に必要な関数はどのようなものか．

5-3　演　算　子

期待値　上記の変換関数の性質について，もう少し述べる．次のような疑問に対する答を求めよう．ある系が波動関数$f(x)$で特定される状態にあり，物理量Aを測定するものとする．測定を何回もくりかえしたときに，Aについて得られる結果の平

均値はどのようであろうか．この平均値（しばしば**期待値**とよばれる）を記号$\langle A\rangle$で表す．

物理量A，B，C，…を同時測定することが原理的に可能であるとする．A，B，…の測定の結果はそれぞれ数a，b，…の連続集合あるいは離散的集合をなすであろう．ある特定の値a，b，c，…が得られる確率は$|F_{a,b,c,\cdots}|^2$である．よって，B，C，…の値が何であろうとも(たとえば，B，C，…についての測定を全く行わない場合)，Aの測定の結果，特定の値aが得られる確率は

$$P(a)=\sum_b\sum_c\cdots|F_{a,b,c,\cdots}|^2 \tag{5-39}$$

となる．この式で，和はb，c，…の連続集合あるいは離散的集合のあらゆる可能な値についてとる．

Aの測定結果の平均値(期待値)を求めるには，(5-39)の確率にaを掛けてaのあらゆる可能な値について和をとる．すなわち，

$$\langle A\rangle=\sum_a\sum_b\sum_c\cdots a|F_{a,b,c,\cdots}|^2 \tag{5-40}$$

このような期待値を計算する必要性は，量子力学的問題においてしばしば生じる．そのような計算を簡単化する公式があれば，有用である．このこと，すなわち演算子の扱いについては，4-1節で少し議論した．ここでいくつかの結果を加える．しかし，本書では，演算子法について実際に徹底的に研究することをしない．なぜなら，この線に沿っていくつか良い著作が出版されているからである*)．

演算子　Aの期待値を，もとの波動関数$f(x)$によって直接表現してみよう．まず，$F_{a,b,c,\cdots}$の絶対値の2乗が

$$|F_{a,b,c,\cdots}|^2=F^*_{a,b,c,\cdots}F_{a,b,c,\cdots} \tag{5-41}$$

と表されることに注意する．よって(5-36)を用いると

$$\begin{aligned}\langle A\rangle&=\sum_a\sum_b\sum_c\cdots a\int dx\,\chi_{a,b,c,\cdots}(x)f^*(x)\int dx'\,\chi^*_{a,b,c,\cdots}(x')f(x')\\&=\int dx\ f^*(x)R(x)\end{aligned} \tag{5-42}$$

と書くことができる．この式の2行目では，

$$R(x)=\int dx'\ G_A(x,x')f(x') \tag{5-43}$$

---

*) たとえば，Dirac, *Principles of Quantum Mechanics* (Clarendon Press, 1947)：邦訳　ディラック『量子力学』(岩波書店，1968)．

という置きかえを行った．ここで

$$G_A(x,x')=\sum_a\sum_b\sum_c\cdots a\,\chi_{a,b,c,\cdots}(x)\,\chi^*_{a,b,c,\cdots}(x') \tag{5-44}$$

と表した．

(5-43)の意味は次のようになる．$R(x)$ は線形積分演算子 $G_A(x,x')$ を用いて積分した結果 $f(x)$ より得られるものであり，この積分演算子 $G_A(x,x')$ は物理量 A と結びついている．(5-43) のような方程式はしばしば象徴的に

$$R=\mathscr{A}f \tag{5-45}$$

と表される．$\mathscr{A}$ は関数 f に作用する線形演算子を表す．今扱っている場合については，$\mathscr{A}$ は(5-43)の右辺に示されている演算操作を表している．つまり，関数 G_A を掛けて積分することを表しているのである．演算子 $\mathscr{A}$ は物理量 A と結びついている．この記号を用いると，

$$\langle A\rangle=\int dxf^*(x)\mathscr{A}f(x)=\int dx\int dx'f^*(x)G_A(x,x')f(x') \tag{5-46}$$

と書くことができる．

問題 5 - 8　(5-44) より $G_A^*(x,x')=G_A(x',x)$ であることに注意．このことを考慮して，$|x|\to\infty$ で 0 となる任意の関数 $g(x)$，$f(x)$ に対して

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx\ g^*(x)\mathscr{A}f(x)=\int_{-\infty}^{\infty}dx\ [\mathscr{A}g(x)]^*f(x) \tag{5-47}$$

がなりたつことを示せ．$\mathscr{A}$ のように (5-47) を満たす演算子は**エルミート演算子**と呼ばれる［(4-30)］を参照］．

問題 5 - 9　座標表示と運動量表示の間の変換関数は

$$\chi_{a,b,c}(\mathbf{r})=e^{(i/\hbar)\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \tag{5-48}$$

である（問題 5 - 6 を参照）．物理量 A として x 方向の運動量成分 p_x をとる．関数 G_A が

$$G_{p_x}(x,x')=\frac{\hbar}{i}\delta'(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z') \tag{5-49}$$

であることを示せ．ここで $\delta'(x)=\dfrac{d}{dx}\delta(x)$ である．この結果を用いて，運動量の x 成分に対応する演算子を求めよ．この運動量成分の期待値が

$$\langle P_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ f^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f}{\partial x}(x) \tag{5-50}$$

と表されることを示せ．

問題 5-10　位置座標の x 成分を物理量 A とする．関数 $G_A(x, x')$ が

$$G_x(x, x') = x\delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z') \tag{5-51}$$

であるとすると，x の平均値に対する正しい公式が得られることを示せ．また，x に対応する演算子は単純に x を掛けることであることを示せ．つまり

$$\mathscr{X} f(x) = xf(x). \tag{5-52}$$

固有関数と固有値　5-2節で議論した波動関数 $\chi_{a,b,c,\cdots}$ は，演算子 $\mathscr{A}$ を作用させたときに特に単純な性質を示す。つまり

$$\mathscr{A} \chi_{a,b,c,\cdots}(x) = a \chi_{a,b,c,\cdots}(x) \tag{5-53}$$

問題 5-11　(5-53) が正しいことを示せ．

関数 χ が (5-53) のような方程式を満たすとき，χ は演算子 $\mathscr{A}$ の固有関数であり，固有値 a をもつ，という．

2つの物理量が同時測定可能の場合，これらの物理量に付随する演算子 $\mathscr{A}$，$\mathscr{B}$ は，興味ある関係式 $\mathscr{A}(\mathscr{B}f) = \mathscr{B}(\mathscr{A}f)$ を満たす．この関係式は次のことを意味する．ある一方の演算操作の後にもう一方の演算操作をした結果は，演算操作を行う順序によらず同じである．このとき，2つの演算子は**可換**である，という．

$$\mathscr{A} \cdot \mathscr{B} = \mathscr{B} \cdot \mathscr{A}$$

一般的には，演算子の間に可換関係を期待することはできないが，特別の場合に可換となる．なぜなら，A と B が同時測定可能な物理量であるとき，それらは同時測定可能な量の集合 $A, B, C, \cdots$ の一部分をなし，その集合には単一の特性関数 $\chi_{a,b,c\cdots}$ が対応するからである．(5-53) において $\mathscr{A}$ を $\mathscr{B}$ におきかえ値 a を b におきかえても (5-53) はなりたつ．よって

$$\mathscr{A}(\mathscr{B}\chi) = \mathscr{A}(b\chi) = b(\mathscr{A}\chi) = ba\chi = ab\chi \tag{5-54}$$

a，b はただの数であるから（演算子ではない），この式は正しい．また，同様に

$$\mathscr{B}(\mathscr{A}\chi) = \mathscr{B}(a\chi) = a(\mathscr{B}\chi) = ab\chi \tag{5-55}$$

2つの式を比較することによって，演算子 $\mathscr{A}$，$\mathscr{B}$ は関数 $\chi_{a,b,c\cdots}$ に作用したときに可

換となることがわかる．$\mathscr{A}$, $\mathscr{B}$は共に線形である（すなわち，χ の高次のべきの演算を含まない）から，可換関係は関数 χ の任意の線形結合についてもなりたつべきものである．

関数 χ が「完全系」をなすならば（典型的にはそうなる），その線形結合によって任意の関数をつくることができる．よって，任意の関数に作用させても AB と BA は同じ結果を与える．すなわち，可換である．

問題 5-12　位置の x 座標と運動量の x 成分とは同時測定が不可能な量であることを示せ．

可換な数学的操作$\mathscr{A}, \mathscr{B}, \mathscr{C}, \cdots$の集合がわかっていてその固有関数を求めなければならない，という状況がよく起こる．その場合，連立方程式

$$\mathscr{A}\chi = a\chi, \ \mathscr{B}\chi = b\chi, \ \mathscr{C}\chi = c\chi, \cdots \tag{5-56}$$

を解かなければならない．

例えば，x, y, z 方向の運動量 p_x, p_y, p_z に対する演算子は $(\hbar/i)\frac{\partial}{\partial x}$，$(\hbar/i)\frac{\partial}{\partial y}$，$(\hbar/i)\frac{\partial}{\partial z}$ である．p_x の値が a，p_y の値が b，p_z の値が c であるような状態に対応する固有関数はどのようなものであろうか(a, b, c はもちろん固有値である)．以下の式を解かなければならない．

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\chi}{\partial x} = a\chi, \ \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\chi}{\partial y} = b\chi, \ \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\chi}{\partial z} = c\chi \tag{5-57}$$

解は $e^{(i/\hbar)(ax+by+cz)}$ に任意定数を掛けたものである．この結果はすでに知っている結果と一致している．すなわち，与えられた運動 $\mathbf{p}$ をもつ粒子の波動関数は $e^{(i/\hbar)\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}$ である．

エネルギー展開の解釈　$\phi_n(x)$ についてのさまざまな表式について，ここでもっと完全な解釈を与えることができる．たとえば，核を時間に依存しないハミルトニアンの解 ϕ_n で展開した式（4-59）を考えよう．

$$K(x_2, t_2; x_1, t_1) = \sum_n \phi_n(x_2)\phi_n^*(x_1)e^{-(i/\hbar)E_n(t_2-t_1)} \tag{5-58}$$

まず，$\phi_n(x)$ は，状態 n にあるときに位置 x に存在する振幅である．したがって，前の議論（5－2節を参照）より，$\phi_n^*(x)$ は，位置 x にあるときに状態 n に存在する振幅である．このような解釈で (5-58) を見てみよう．時刻 t_1 に位置 x_1 を出発して時刻 t_2 に位置 x_2 に到達する振幅は，選択肢についての和である．ここで，選択肢を異なるエネルギー状態に分けて，その状態間で遷移が起こるものと考えよう．つまり，次の3つの項の積を，すべての状態 n について足しあわせるのである．

1．$\phi_n^*(x_1)$．これは x_1 にあるとき状態 n に存在する振幅である．

2．$e^{-(i/\hbar)E_n(t_2-t_1)}$．時刻 t_1 において状態 n にあるとき，時刻 t_2 において状態 n に存在する振幅である*)．

3．$\phi_n(x_2)$．状態 n にあることがわかっているとき，x_2 に見出される振幅である．

問題5-13　$\phi_n(x)$ を，5－2節で議論した関数 $\chi_{a,b,c,\cdots}(x)$ として解釈する可能性を議論せよ．すなわち，$\phi_n(x)$ が，x 表示から n で特定される表示（エネルギー表示）に変える変換関数であることを示せ．

*）状態を変えるような振幅はない．これが，特別な関数 ϕ_n の重要な点である．

第6章　量子力学における摂動論

作用積分に2次の項のみが現れるポテンシャルの影響の下にある量子力学系の場合について，すでに第3章でその系の運動が経路積分の方法によって決定されることを述べた．しかしながら量子力学の問題に現れる興味あるポテンシャルの多くはこのタイプのものでなく，簡単には扱えない．この章ではもっと複雑なポテンシャルを扱う方法を展開する．これから議論する方法は摂動展開と呼ばれるもので，ポテンシャルが比較的弱い（たとえば系の運動エネルギーと較べて）ときに有効である．

摂動展開を厳密に数学的に展開することはできるが，興味ある物理的解釈をもたせることもできる．この解釈は，この章で示すように量子力学的振る舞いについて深い理解をもたらす．

この章の第2節で摂動法の特別な応用を扱う．原子によって散乱される電子の運動を考える．散乱相互作用を記述する際に，入射電子に対する原子の断面積の古典的な概念が有効であることがわかる．この断面積は原子の実際の大きさに関連しているが，その完全な記述を行おうとすれば，相互作用する系の量子力学的な側面を考慮しなければならない．

6-1　摂 動 展 開

展開の項　粒子がポテンシャル $V(x,t)$ の中を運動するものとする．当面，運動は1次元に限定されているものとする．このとき点 a と b の間における運動に対する核は

$$K_V(b,a)=\int_a^b \mathcal{D}x(t)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}dt\left[\frac{m}{2}\dot{x}^2-V(x,t)\right]\right\} \tag{6-1}$$

となる．下添え字つきの記号 K_V を用いたのは粒子がポテンシャル V の中を運動していることを思い起こさせるためである．これより後は K_0 は自由粒子の運動の核を表す．

ある場合には核 K_V はすでに述べた方法によって決められる．たとえば，第3章で外力 $f(t)$ の下にある調和振動子に対する核を決めた．このときポテンシャルは［(3.65) を見よ］

$$V(x, t)=\frac{m}{2}\omega^2x^2-xf(t) \tag{6-2}$$

であった．一般にポテンシャルが x について2次のとき，核は厳密に求められる．ポテンシャルが十分にゆっくり変化する関数であるならば，半古典近似が適切である．他にも Schrödinger 方程式を用いてうまく取り扱うことのできるポテンシャルがいくつかある．ポテンシャルの効果が小さいときにしばしば有効な方法を述べよう．

ポテンシャルが小さいとしよう．もっと厳密にいうと，経路に沿ってポテンシャルの時間積分が $\hbar$ と比較して小さいとしよう．このとき (6-1) の指数部分のうち $V(x, t)$ に依存する部分は次のように展開される．

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}dt\,V(x, t)\right]=1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}dt\,V(x, t)+\frac{1}{2!}\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2\left[\int_{t_a}^{t_b}dt\,V(x, t)\right]^2+\cdots \tag{6-3}$$

これは任意の経路 $x(t)$ に沿って定義される．

この展開を(6-1)に代入すると

$$K_V(b, a)=K_0(b, a)+K^{(1)}(b, a)+K^{(2)}(b, a)+\cdots \tag{6-4}$$

が得られる．ここで

$$K_0(b, a)=\int_a^b\mathcal{D}x(t)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}dt\,\frac{m\dot{x}^2}{2}\right) \tag{6-5}$$

$$K^{(1)}(b, a)=-\frac{i}{\hbar}\int_a^b\mathcal{D}x(t)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}dt\,\frac{m\dot{x}^2}{2}\right)\int_{t_a}^{t_b}ds\,V(x(s), s) \tag{6-6}$$

$$K^{(2)}(b, a)=-\frac{1}{2\hbar^2}\int_a^b\mathcal{D}x(t)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}dt\,\frac{m\dot{x}^2}{2}\right)\int_{t_a}^{t_b}ds\,V(x(s), s)\int_{t_a}^{t_b}ds'\,V(x(s'), s') \tag{6-7}$$

などである．V についての積分で混乱を避けるために時間変数 s, s' などを書き入れた．

項の評価　初めに核 $K^{(1)}$ を考えよう．変数 s についての積分と経路 $x(t)$ について

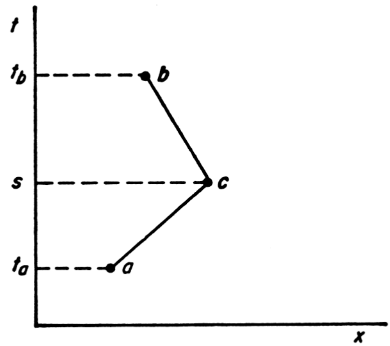


図6-1　1個の粒子が a から出発して自由粒子として運動して c に到達する．その粒子は，ポテンシャル $V[x(s),s]=V_c$ の作用を受けて散乱される．その後，自由粒子として運動し b に到達する．このような運動の振幅は (6-10) に与えられている．この振幅を点 c のあらゆる可能な位置について積分すると，その結果は摂動展開の1次の項である．

の積分の順序を入れ替えたい．

$$K^{(1)}(b,a)=-\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}ds\,F(s) \tag{6-8}$$

と書く．ここで

$$F(s)=\int_a^b \mathcal{D}x(t)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}dt\,\frac{m\dot{x}^2}{2}\right)V(x(s),s) \tag{6-9}$$

経路積分 $F(s)$ は次のように記述される．これは自由粒子の振幅をすべての経路について加え合わせたものである．しかしながら時刻 s におけるポテンシャル $V[x(s),s]$ の重みをそれぞれの経路に掛けてある．この特定の V に効いてくる経路 $x(t)$ の寄与は，特定の時刻 $t=s$ における経路の位置のみである．すなわち，時刻 s の前後では $F(s)$ の中の経路は通常の自由粒子の経路である．この状況は図6-1に示されている．

(2-31) を導いたときと同じ議論を用いて，それぞれの経路を2つの部分に分ける．1つは時刻 $t=s$ 以前，もう1つはこの時刻以後である．もっと問題に即していうと，それぞれの経路がこの分割時刻において点 x_c を通ることにする．後に x_c のすべての値について積分する．点 $x_c(s)$ を c (すなわち，$s=t_c$) で表すと，すべてのこのような経路についての和は $K_0(b,c)K_0(c,a)$ と書ける．これより $F(s)=F(t_c)$ は次のように書ける．

$$F(t_c)=\int_{-\infty}^{\infty}dx_c\ K_0(b,c)V(x_c,t_c)K_0(c,a) \tag{6-10}$$

これを(6-8)に代入すると［$V(c)=V(x_c,t_c)$ と略記する］,

$$K^{(1)}(b,a)=-\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}dt_c\int_{-\infty}^{\infty}dx_c\ K_0(b,c)V(c)K_0(c,a) \tag{6-11}$$

が得られる.

ここで x についての積分の上限下限は $\pm\infty$ と表される. 実際の問題では上限下限はポテンシャル (多くの場合, x が大きいところでポテンシャルは0となる) や x の領域を制限する装置によって決まる.

項の解釈　(6-11)は大変重要で有用であるから, これを物理的に考えるのに役立つ特殊な解釈を述べる. ポテンシャルと粒子の相互作用を**散乱**という. すなわちポテンシャルが粒子を散乱し, ポテンシャルによって散乱される振幅は単位体積当たり単位時間に $-(i/\hbar)V$ である.

この解釈によれば K_V を次のように記述できる. K_V はもちろん粒子が点 a から点 b に行くいろいろな行き方について和をとったものである. それらの行き方とは次のようなものである.

1. 粒子は全く散乱されない［$K_0(b,a)$］
2. 粒子は1回散乱される［$K^{(1)}(b,a)$］
3. 粒子は2回散乱される［$K^{(2)}(b,a)$］

など. この解釈に合うように, 粒子のいろいろな経路が図6-2に示されている.
これらの選択肢はまたそれぞれいくつかの選択肢の組み合わせで表される. たとえば, 単一散乱の核 $K^{(1)}(b,a)$ を考えよう. この核を構成する選択肢の1つは次のような運動からなる. 粒子は a から出発して自由粒子として点 x_c, $t_c=c$ まで動き, そこでポテンシャル $V(c)$ によって散乱され, その後自由粒子として点 c から最終点 b まで動く. このような経路に対する振幅は

$$K_0(b,c)\left[-\frac{i}{\hbar}V(c)dx_c\,dt_c\right]K_0(c,a) \tag{6-12}$$

である (通常, 粒子の運動の順序は式を逆方向に, つまり右から左に読むことで理解される).

振幅を構成するときは, 2-5節で述べた規則による. すなわち, 時間的に続いて起こる事象の振幅は積となる. 核 $K^{(1)}$ の完全形は(6-11)に示したように x_c と t_c につ

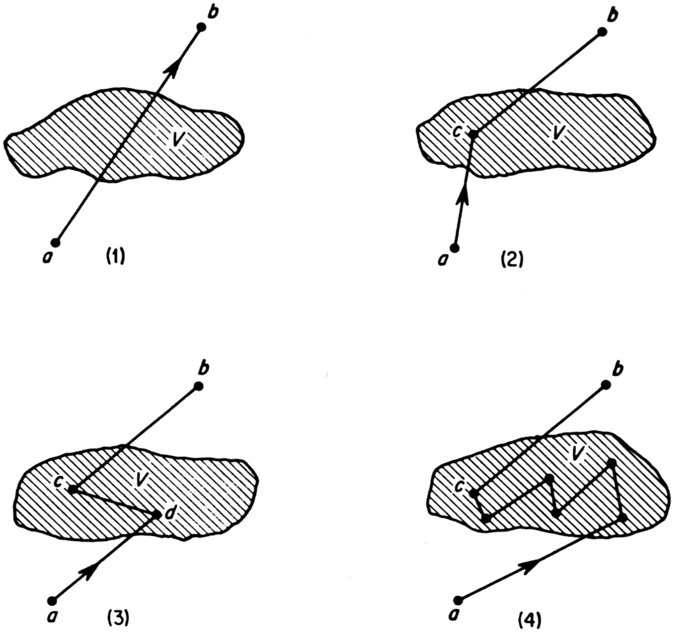


図6-2　(1)では，粒子がポテンシャル V を通って a から b に運動するが散乱されない．(2)では，粒子はポテンシャル V を通過するときに c で 1 回散乱される．この事象に対する振幅は $K^{(1)}(b,a)$ である．(3)では，粒子は 2 回散乱され，その振幅は $K^{(2)}(b,c)$ である．(4)では，粒子は n 回散乱され，最後の散乱は c で起こる．任意の数の散乱の後 a から b に到る運動の全振幅は $K_0+K^{(1)}+K^{(2)}+\cdots+K^{(n)}+\cdots$ である．

いて積分することにより選択肢の和をとって得られる．

このような考え方で二重散乱の振幅 $K^{(2)}$ も直ちに書き下すことができる．

$$K^{(2)}(b,a)=\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\int d\tau_c\int d\tau_d\ K_0(b,c)V(c)K_0(c,d)V(d)K_0(d,a) \qquad (6\text{-}13)$$

ここで $d\tau=dxdt$ である．右から左に読むことにより，この式は次のように解釈される．粒子は a から d まで自由粒子として動く．d において粒子はポテンシャル $V(d)$ によって散乱される．それから自由粒子として d から c へ動き，c においてポテンシャル $V(c)$ によって散乱される．その後，再び自由粒子として c から b へ動く．このようなすべての選択肢について和をとる．すなわち，散乱が起こるすべての場所と時刻について経路の和をとる．

ここで暗黙のうちに $t_c>t_d$ を仮定した．このような仮定をそれぞれの散乱過程について具体的に導入するという複雑化を避けるために，第 4 章［(4-28) を見よ］で用いた約束を使うことにし，$t_b<t_a$ に対して

$$K(b,a)=0 \tag{6-14}$$

とする．そうすると (6-13) は t_c と t_d の積分領域に制限を加えることなしに正しい式となる．

(6-7) にあった因子 1/2 が (6-13) では一見省略されているように見えるのに疑問を抱く読者もいるであろう．(6-13) で t_d の積分領域は t_a から t_b であるが，t_c の領域は t_d と t_b の間に制限されている．この制限は二重積分の値を半分にしている．このことをもっとはっきりと見るためには，(6-7) の二重積分を次のように書き換える．

$$\int_{t_a}^{t_b} ds\int_{t_a}^{t_b} ds'\, V[x(s),s]\,V[x(s'),s'] = \int_{t_a}^{t_b} ds\int_{s}^{t_b} ds'\, V[x(s),s]\,V[x(s'),s'] + \int_{t_a}^{t_b} ds\int_{t_a}^{s} ds'\, V[x(s),s]\,V[x(s'),s'] \tag{6-15}$$

この方程式の右辺の第 1 項は (6-14) に示した制限を満たしている．積分の順序を交換すれば，右辺の第 2 項は

$$\int_{t_a}^{t_b} ds'\int_{s'}^{t_b} ds\, V[x(s),s]\,V[x(s'),s'] \tag{6-16}$$

と書ける．この式の中の変数 s と s' を入れ替えても，二重積分の値は同じである．すなわち，(6-15) の右辺の第 1 項と第 2 項は等しく，それぞれもとの二重積分の値の半分である．同様の議論により $K^{(n)}$ の式の中の因子 $1/n!$ も考慮される．

問題 6-1　ポテンシャルが $U+V$ と書かれ，V は小さく U は大きいものとする．さらに，ポテンシャルがUだけの場合に運動の核が得られるものとする（たとえば，Uがxについての 2 次式であって時間によらない場合など)．全ポテンシャル$U+V$ の中の運動が K_0 を K_U で置き換えることにより，(6-4)，(6-11)，(6-13)，(6-14) によって記述されることを示せ．ここで K_U はポテンシャル U だけの中の運動に対する核である．$-(i/\hbar)V$ はポテンシャルの摂動部分によって散乱される振幅（単位体積単位時間当たり）であるということができる．K_U は無摂動ポテンシャル U の中の系の運動の振幅である．

問題 6-2　ポテンシャル $V(x,y)$ のみによって相互作用する 2 粒子からなる系がある．ここで x は第 1 の粒子の座標を表し，y は第 2 の粒子の座標を表す［3-8節と

(3-75) を参照]．この相互作用を除けば粒子は自由である．V が 0 ならば K は単に 2 つの自由粒子の核の積である．このことを用いて，$K_V(x_b, y_b, t_b; x_a, y_a, t_a)$ に対する摂動展開をせよ．どのような物理的考えに基づく規則によって，この展開の各項は記述されるか．

6-2　K_V に対する積分方程式

前節の結果を特別な場合に適用する前に，ポテンシャル場の中を運動する系の核と波動関数についてのいくつかの数学的関係を述べる．これまでに得られた結果を用いて (6-4) を次のように書く．

$$K_V(b, a) = K_0(b, a) - \frac{i}{\hbar}\int d\tau_c\ K_0(b, c)V(c)K_0(c, a)$$
$$+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\int d\tau_c\int d\tau_d\ K_0(b, c)V(c)K_0(c, d)V(d)K_0(d, a) + \cdots \tag{6-17}$$

この式は次のように表すこともできる．

$$K_V(b, a) = K_0(b, a) - \frac{i}{\hbar}\int d\tau_c\ K_0(b, c)V(c)\Big[K_0(c, a)$$
$$-\frac{i}{\hbar}\int d\tau_d\ K_0(c, d)V(d)K_0(d, a) + \cdots\Big] \tag{6-18}$$

括弧の中の式は (6-17) と同じ形である．どちらの場合も無限個の項についての和である．よって K_V は

$$K_V(b, a) = K_0(b, a) - \frac{i}{\hbar}\int d\tau_c\ K_0(b, c)V(c)K_V(c, a) \tag{6-19}$$

と書かれ，これは厳密な式である．これは K_0 が与えられたときに K_V を決める積分方程式である（問題6-1で述べたような状況のときは，K_0 は K_U で置き換えられる）．このようにして経路積分の問題は積分方程式に変換されたのである．

この結果は次のような物理的意味をもつ．a から b への系の遷移に対する全振幅は，散乱の数がいくらであっても 2 つの選択肢の和で表される．1 つの選択肢は散乱なしに遷移が起こる振幅であり，K_0 と表される．2 番目の選択肢は 1 つ以上の散乱によって遷移が起こる振幅であり，(6-19) の第 2 項で表されている．この第 2 項の点 c は最後の散乱が起こった点であると考えることができる．ポテンシャル場の中で系は a から b へ運動するが，その運動は K_V によって厳密に記述される．そして点 c において最後の散乱が起こり，その後系は自由な系として（散乱を受けないで）点 b に到る．この運動は K_0 によって表される．この解釈は図6-3に表されてい

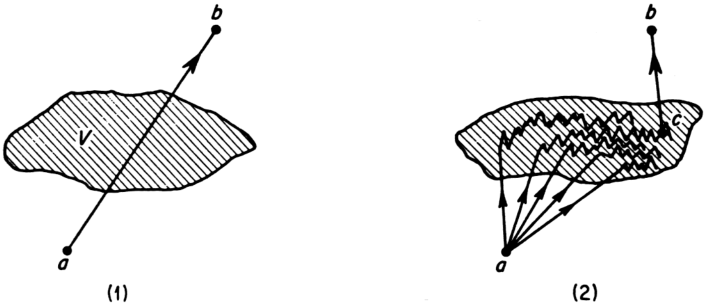


図6-3 (1)では，粒子は，自由粒子としてポテンシャル V を通過して a から b まで動く．この振幅は $K_0(b,a)$ である．(2)では，粒子は V によって1回以上散乱される．最後の散乱は c で起こる．a から c への運動は $K_V(c,a)$ によって記述され，c から b への運動は $K_0(b,c)$ によって記述される．c のあらゆる位置が考慮されるときに，(1)と(2)の状況を組みあわせたものはあらゆる可能な場合を尽くすことになり，$K_V(b,a)$ が (6-19) の形で得られる．

る．

最後の散乱は a と b の間の任意の時間・空間の点で起こり得るのであるから，(6-19)の最後の項の積分で表されるこの複合運動の振幅は，点 c のすべての可能な位置について積分されるべきである．

問題 6-3　自由粒子について (4-29) は次の式になる．

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_b}K_0(b,a)+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_b^2}K_0(b,a)=i\hbar\delta(t_b-t_a)\delta(x_b-x_a) \tag{6-20}$$

この結果と (6-19) から，核 K_V が微分方程式

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_b}K_V(b,a)+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_b^2}K_V(b,a)+V(b)K_V(b,a)=i\hbar\delta(x_b-x_a)\delta(t_b-t_a) \tag{6-21}$$

を満たすことを示せ．

6-3　波動関数の展開

3-4節で波動関数の考えを導入し，波動関数と核との間のいくつかの関係について述べた．その節の (3-42) によれば，過去の時刻 t_a における波動関数が与えられたときに，2つの時刻 t_a，t_b の間の系の運動を記述する核を用いると，時刻 t_b におけ

る波動関数が得られる．この節の目的のために，(3-42) を次のように書く．

$$\psi(b)=\int dx_a\ K_V(b,a)f(a) \tag{6-22}$$

ここで $f(a)$ は時刻 $t=t_a$ における波動関数の値であり［すなわち，$f(a)$ は x_a の関数である］，$\psi(b)$ はその後の時刻 $t=t_b$ における波動関数である*)．これら2つの時刻の間，系はポテンシャル V の中で運動し，その運動は核 $K_V(b,a)$ で記述されるものと仮定する．

K_V に対する級数展開(6-18)を上の方程式に代入すると，$\psi(b)$ に対する級数展開が得られる．

$$\psi(b)=\int dx_a\ K_0(b,a)f(a)$$
$$-\frac{i}{\hbar}\int d\tau_c\int dx_a\ K_0(b,c)V(c)K_0(c,a)f(a)+\cdots \tag{6-23}$$

この級数の第1項は，系が時刻 t_a と t_b の間で自由[K_0 を K_U で置き換えた場合は無摂動]であるとした場合の時刻 t_b における波動関数である．この項を ϕ と呼ぶことにしよう．

$$\phi(b)=\int dx_a\ K_0(b,a)f(a) \tag{6-24}$$

この定義を用いると，(6-23) の級数は次のように書かれる．

$$\psi(b)=\phi(b)-\frac{i}{\hbar}\int d\tau_c\ K_0(b,c)V(c)\phi(c)$$
$$+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\int d\tau_c\int d\tau_d\ K_0(b,c)V(c)K_0(c,d)V(d)\phi(d)+\cdots \tag{6-25}$$

この形の級数を ψ に対する **Born 展開**と呼ぶ．初めの2項だけ（すなわち，V について1次まで）を取り入れた結果を**第1 Born 近似**と呼ぶ．これはポテンシャル V による一重散乱だけを含む．この散乱は点 c において起こる．この点に到るまで $\phi(c)$ で記述される系は自由である．散乱の後，系は c から b まで再び自由に動き，$K_0(b,c)$ で記述される．散乱が生じ得るすべての点についての積分をする必要がある．級数の3項（すなわち，V について2次まで）を用いた結果は**第2 Born 近似**と呼ばれる．以下，逐次近似を上げていくことができる．

---

*)　$t_b<t_a$ に対して $K(b,a)=0$ とおく，ということにすると，$t_b<t_a$ のときに (6-22) は正しくない．しかし，このような t の値の場合には (6-22) を用いないことにする．

問題 6 - 4　(6-19) に到る議論と同様にして，波動関数 $\psi(b)$ が積分方程式

$$\psi(b)=\phi(b)-\frac{i}{\hbar}\int d\tau_c\ K_0(b,c)V(c)\psi(c) \tag{6-26}$$

を満たすことを示せ．この積分方程式は Schrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V\psi=0 \tag{6-27}$$

と等価である．1次元に限定して，どのようにして積分方程式から Schrödinger 方程式が導かれるかを示せ．

6 - 4　原子による電子の散乱

数学的取り扱い　これまで摂動論の概念と公式をやや抽象的な枠組みで述べてきた．摂動論の物理的意味を述べるために，高速電子が原子によって散乱されるという特殊な問題を議論する．図6-4のように，電子線が標的（たとえば，金属の薄板）に照射され，適切な計測器に集められるという実験を念頭におく．

散乱粒子のエネルギーが飛行時間法により決定されるものとする．すなわち，ある時刻 $t=0$ に線源から電子を放出し，ある時間遅れ T ののちに計測器に電子が到

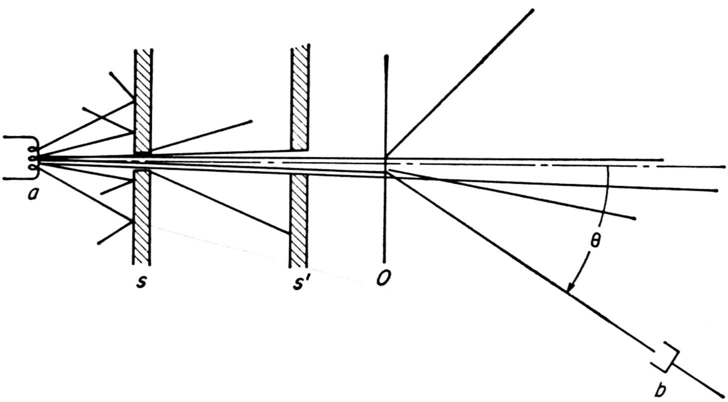


図6-4　電子が a にある高温のフィラメントから熱放射され，s と s' にあるコリメーターの穴を通して電子線となる．そして，O にある薄膜の標的に衝突する．ほとんどの電子が散乱されることなく直進して通過する（ただし，電子のエネルギーは十分大きくまた標的は十分薄いとする）．しかし，いくつかの電子は標的内の原子と相互作用して偏向される．たとえば，角度 θ だけ散乱されて b に到る．b にある計測器を上下させると，散乱の相対数と散乱角 θ との間の関係が測定される．

達する確率を求める．このとき，ある特定の時間に1つの点から他の点に到る振幅 $K(b,a)$ についての前節までの結果を直接用いることができる．

それぞれの電子がたかだか1個の原子と相互作用をするくらいに薄板が十分薄いかあるいは相互作用が弱いと仮定して，問題を簡単にすることができる．実際この仮定は多くの散乱実験において極めて現実的である．さらに，ほとんどの多重散乱は1個の原子による単純散乱を重ねることによって解析できる．したがって，ここでは1個の電子と1個の原子の間の相互作用を議論する．

原子の中心を座標系の原点にとる．図6-5に示されているように，電子は時刻 $t=0$ に点 a から放出される．点 b に設置された計測器は，時刻 $t=T$ において電子が b に到達するか否かを示す．次のような近似をしよう．

1. 相互作用は第1ボルン近似で表される．すなわち，電子は原子によって1回だけ散乱される．

2. 原子は空間に固定され，時間的に一定のポテンシャル $V(\mathbf{r})$ によって表される．

実際，原子は電子と相互作用する非常に複雑な系である．電子と原子の間の相互作用は実際もっと複雑で簡単なポテンシャル $V(\mathbf{r})$ では表されない．電子は原子を励起したりイオン化したりして，その過程でエネルギーを失う．しかしながら，電子と原子の間の弾性散乱だけを考えることにし，散乱の前後で原子のエネルギー状態が変わらないものとすると，上の近似1は有効であり，また近似2も有効である．

原子の中心を原点とし，電子が放出される点，電子が検出される点をそれぞれ，

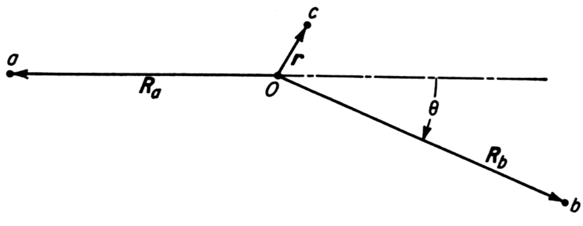


図6-5　散乱問題の幾何学．電子は a から出発して自由粒子として運動し c に到る．c では原子ポテンシャルに $V(r)$ によって散乱される．散乱の後に b にある計測器に到る．b は，散乱中心 O から動径ベクトル $\mathbf{R}_b$ のところに位置している．この散乱過程で電子は，非散乱電子線の方向から測って角度 θ だけ散乱される．この過程は第1次 Born 近似に対応する．2回の散乱（散乱の起こる位置を c，d とする）に対する振幅を含める場合，その結果は第2次近似である．

$\mathbf{R}_a$, $\mathbf{R}_b$ とする．計算の際，$\mathbf{R}_a$, $\mathbf{R}_b$ の長さは原子の半径と較べてずっと大きいものとする．すなわち，$|\mathbf{R}_a|$, $|\mathbf{R}_b|$ よりもずっと小さい距離でも，原子ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ は無視できるほどに小さいものと仮定する．このように飛行している時間のほとんどの間，電子は自由粒子として運動し，原点の近傍でのみポテンシャルの影響を受ける．

第1ボルン近似は2つの項からなるが，第2項だけが興味ある．第1項は自由粒子として電子が a から b へ運動することに対する核 $K_0(b,a)$ であり，すでに十分議論した．興味ある項は次の項である．

$$K^{(1)}(b,a)=-\frac{i}{\hbar}\int d\tau_c\ K_0(b,c)V(c)K_0(c,a)$$
$$=-\frac{i}{\hbar}\int d^3\mathbf{r}\int_0^T dt\left[\frac{m}{2\pi i\hbar(T-t)}\right]^{3/2}\exp\left[\frac{im|\mathbf{R}_b-\mathbf{r}|^2}{2\hbar(T-t)}\right]V(\mathbf{r})$$
$$\times\left[\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right]^{3/2}\exp\left[\frac{im|\mathbf{R}_a-\mathbf{r}|^2}{2\hbar t}\right] \qquad (6\text{-}28)$$

ここで原点から点 c に到るベクトルを $\mathbf{r}$ で表し，ベクトル $\mathbf{r}$ の3成分の微分の積を $d^3\mathbf{r}$ で表した．t についての積分（付録を参照）の結果次式が得られる．

$$K^{(1)}(b,a)=-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{5/2}T$$
$$\times\int d^3\mathbf{r}\left(\frac{1}{r_a}+\frac{1}{r_b}\right)\exp\left[\frac{im}{2\hbar T}(r_a+r_b)^2\right]V(\mathbf{r}) \quad (6\text{-}29)$$

ここで $r_a=|\mathbf{R}_a-\mathbf{r}|$, $r_b=|\mathbf{R}_b-\mathbf{r}|$. これらの定義を用いて次のように書くことができる．

$$r_a=R_a\left(1-\frac{2\mathbf{R}_a\cdot\mathbf{r}}{R_a^2}+\frac{r^2}{R_a^2}\right)^{1/2}\simeq R_a+\mathbf{i}_a\cdot\mathbf{r} \qquad (6\text{-}30)$$

$$r_b=R_b\left(1-\frac{2\mathbf{R}_b\cdot\mathbf{r}}{R_b^2}+\frac{r^2}{R_b^2}\right)^{1/2}\simeq R_b-\mathbf{i}_b\cdot\mathbf{r} \qquad (6\text{-}31)$$

ここで $\mathbf{i}_a$ と $\mathbf{i}_b$ はそれぞれ $-\mathbf{R}_a$, $\mathbf{R}_b$ の方向の単位ベクトル（すなわち，$\mathbf{i}_a=-\mathbf{R}_a/R_a$, ここで $R_a=|\mathbf{R}_a|$）であり，近似の際にポテンシャルが効いている領域の $|\mathbf{r}|$ の値よりも R_a がずっと大きいということを用いた．指数因子において r の1次のオーダーだけを残せばよい．なぜならこの因子は位相のわずかの変化に対してとても敏感であるからである．ここで次の展開式が必要となる．

$$(r_a+r_b)^2\simeq(R_a+R_b)^2+2(R_a+R_b)(\mathbf{i}_a\cdot\mathbf{r}-\mathbf{i}_b\cdot\mathbf{r}) \qquad (6\text{-}32)$$

これらの近似を用いると核を次のように表すことができる．

$$K^{(1)}(b,a)\simeq -\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{5/2}T\left(\frac{1}{R_a}+\frac{1}{R_b}\right)\exp\left[\frac{im}{2\hbar T}(R_a+R_b)^2\right]$$
$$\times\int d^3\mathbf{r}\exp\left[\frac{im}{\hbar T}(R_a+R_b)(\mathbf{i}_a\cdot\mathbf{r}-\mathbf{i}_b\cdot\mathbf{r})\right]V(\mathbf{r}) \tag{6-33}$$

物理的解釈　(6-33)を調べることにより運動の物理的特性について推論することができる．時間 T の間に電子は全距離 R_a+R_b を動いた．したがってこの時間の間，速度は $u=(R_a+R_b)/T$ であり，エネルギーは $mu^2/2$，運動量は mu である．これらの式を書くとき，電子のエネルギーは散乱過程によって変化しないと仮定する．

上記の速度，エネルギー，運動量の値が矛盾していないことは，(6-33)の積分の前にある指数因子を調べることにより確かめられる．この指数項の位相は $m(R_a+R_b)^2/2\hbar T$ であり，この位相を T について微分したものは振動数

$$\omega=\frac{m}{2\hbar}\frac{(R_a+R_b)^2}{T^2} \tag{6-34}$$

を与える．上で定義した u を用いるとこの式からエネルギーが $mu^2/2$ であることがわかる［(3-15) を参照］．

位相を R_b について微分すると点 b における波数が得られる．

$$k=\frac{m}{\hbar}\frac{R_a+R_b}{T} \tag{6-35}$$

これは運動量の大きさが mu であることを意味する［(3-12) を参照］．

問題 6-5　(6-28) の t の積分は定常位相法によって近似できる．このような方法をこの積分に適用することにより，積分に対する寄与の大部分が $t=R_a/u$ の近傍からくることを示せ．この t の値は，電子が古典的に運動するとき原子の中心に到達する時刻である．

$u=(R_a+R_b)/T$ で定義される電子の速度を用いて，入射運動量ベクトル $\mathbf{p}_a$ を

$$\mathbf{p}_a=mu\mathbf{i}_a \tag{6-36}$$

で定義し，放射運動量ベクトル $\mathbf{p}_b$ を

$$\mathbf{p}_b=mu\mathbf{i}_b \tag{6-37}$$

で定義する．このとき (6-33) は

$$K^{(1)}(b,a)=-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar}\right)^{5/2}\frac{u}{T^{1/2}R_aR_b}\exp\left(\frac{im}{2\hbar}u^2T\right)$$
$$\times\int d^3\mathbf{r}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_a-\mathbf{p}_b)\cdot\mathbf{r}\right]V(\mathbf{r}) \tag{6-38}$$

と表される．運動量変化，すなわち運動量の移動を

$$\mathbf{q}=\mathbf{p}_a-\mathbf{p}_b$$

で表し，次の量を定義する．

$$v(\mathbf{q})=\int d^3\mathbf{r}\ e^{(i/\hbar)\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}V(\mathbf{r}) \tag{6-39}$$

電子が点 b に到達する確率は核 $K_V(b,a)$ の絶対値の2乗で与えられる．したがって確率はこの核の級数展開の第1項 $K_0(b,a)$ に依存する．これは小さな摂動項 $K^{(1)}(b,a)$ を完全に覆い隠すほどに大きい可能性がある．

このことから，多くの散乱実験において，入射粒子線を適当な遮蔽物で絞ることにより，標的中の原子によって散乱されない電子がある特別な直線上（方向）に限定されるようにすることが一般的である（図6-6を見よ）．もちろん，3-2節，3-3節で述べたように，このコリメーターから回折も若干ある．すなわち，散乱されない電子もこの中心粒子線の外に現れる．しかしながらコリメーターの絞りを適当にし，中心粒子線から十分遠くの点をとると，コリメーターから回折される電子の数は標的中の原子によって散乱される電子の数と較べて非常に小さくなる．

このような領域において，電子が到達する確率は少なくとも1次のオーダーで $K^{(1)}(b,a)$ の絶対値の2乗だけで与えられる．(6-38)，(6-39) を用いるとこの確率は

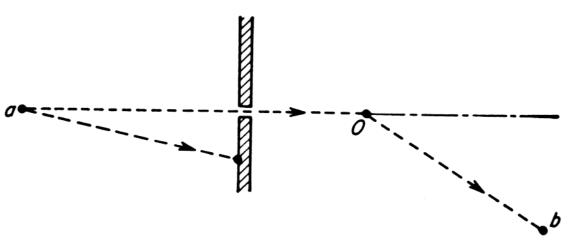


図6-6　b において0次の項を消去するためのコリメーターの原理．少なくとも1回散乱された電子のみが，有限の確率で a から b に到達する．よって，$K_V(b,a)$ の摂動展開の0次の項は無視できる程度しか寄与しないので無視する．重要な最初の項は $K^{(1)}(b,a)$ である．

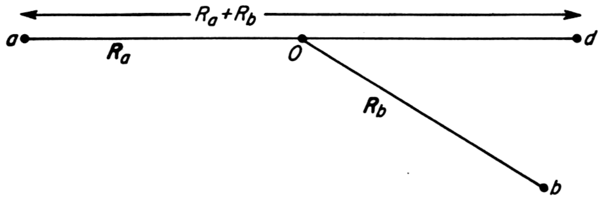


図6-7　b と d は O から等距離にあるとする．その距離を R_b とする．その場合，これら2つの位置に到達する電子の数の差（あるいは比）は散乱現象のみに依存する．点 d が非散乱電子の進行線上にあるならば，b に到達する電子数と散乱源がない場合に d に到達する電子数との比は b への散乱確率である．

$$\frac{P(b)}{\text{単位体積}}=\frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^5\frac{u^2}{TR_a^2R_b^2}|v(\mathbf{q})|^2 \tag{6-40}$$

となる．

この最後の式で因子 $v(\mathbf{q})$ には原子ポテンシャルの特性と R_a と R_b の相対的方向に対する核の依存性が含まれている．これは実験装置の大きさに全く依存しない．このような大きさの効果は（6-40）の残りの因子によって表されている．たとえば，$1/R_a^2$ という項は，電子が原子に実際衝突する確率が R_a^2 に逆比例して変化するということを考えれば，容易に理解できる．コリメーターによる遮蔽の存在を仮定する以上，この実験にこの考えを適用できるか否かは疑問であろう．しかしながら，コリメーターの効果は原子の大きさのところで無視できるほどのものである．標的原子から見ると，入射電子線は1つの線源から全方向に拡がる電子からなるように見える．

同様にして散乱の後に電子は標的原子から全方向にふたたび拡がる．したがって計測器の中に電子を見出す単位体積当たりの確率は R_b^2 に逆比例して変化する．この実験のもっと興味深いところは関数 $v(\mathbf{q})$ に含まれているので，次節でこの関数について特に注目する．

他の因子は核の規格化の仕方に依存する．上の公式は比の形で表すと容易に解釈可能である．図6-7に示すように，散乱された粒子を b に見出す確率と，散乱なしで原子の背後の点 d（a からの距離は R_a+R_b で，時刻は T であり，速度は同じに保たれている）に見出す確率とを比較する．ここで，単位体積当たりの確率 $P(d)$ を計算する際には原子は存在しないものとする．結果は $|K_0(d,a)|$ であり

$$\frac{P(d)}{\text{単位体積}}=\left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^3\frac{u^2}{T(R_a+R_b)^2} \tag{6-41}$$

したがって

$$\frac{P(b)}{P(d)}=\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2|v(\mathbf{q})|^2\frac{(R_a+R_b)^2}{R_a^2R_b^2} \tag{6-42}$$

最後の因子を次節で幾何学的に解釈する．そこで関数 $v(\mathbf{q})$ についてさらに詳細に調べる．

散乱断面積　散乱実験における原子の特性を**断面積**の考えを用いて記述すると便利である．このような概念を用いると古典物理学の線に沿って考えることができるからである．断面積 σ は電子が原子に衝突する際に単位立体角の方向に散乱されるための原子の有効面積（古典的描像で見て）として定義される．この立体角は原子の位置を中心とする球の球面積で測る．したがって，断面積は散乱角(すなわち $\mathbf{R}_a$ と $\mathbf{R}_b$ の間の角)の関数である．このような古典的模型によって電子が点 b に到達する確率を決めることができる．

点 a から出発した粒子束が距離 R_a にある小さな標的（断面積 $d\sigma$）に衝突するならば，散乱された粒子は d の領域から除かれるであろう．そのまま進めば d の領域で粒子束は $[(R_a+R_b)/R_a]^2d\sigma$ の面積に拡がっている．実際は，b に向かって立体角 $d\Omega$ の方向に散乱され，図6-8に示すように面積 $R_b^2d\Omega$ に拡がる．したがって b に粒子を見出す確率と標的がないときに粒子を d に見出す確率との比はこれらの面積の比の逆数となる．

$$\frac{P(b)}{P(d)}=\frac{(R_a+R_b)^2d\sigma/R_a^2}{R_b^2d\Omega} \tag{6-43}$$

(6-42) と (6-43) を比較することにより，単位立体角当たりの断面積が

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2|v(\mathbf{q})|^2 \tag{6-44}$$

となることがわかる．

(6-40) を直接用いないで断面積で表現することの長所は次のとおりである．(6-44)は特別な実験条件に依存しない．異なる実験で得られる断面積を直接比較することができる．単位体積当たりの確率はそうでない．

この有効標的の概念は純粋に古典的であり，散乱確率を記録するのに便利であることを強調しておく．これと原子の大きさとの間に直接的関係はないし，散乱機構

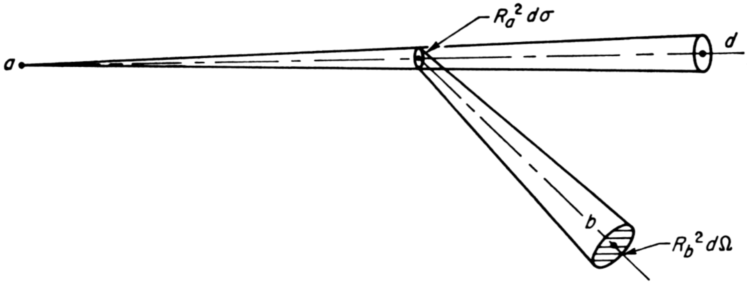


図6-8　標的の面積片 $d\sigma$ に衝突する粒子は，角度 θ だけ偏向されて立体角 $d\Omega$ の面内に散乱される．標的が存在しないならば，粒子は d に到るはずである．しかし，標的に散乱されて b に到達し，面積 $R_b^2 d\Omega$ だけ拡がる．d に粒子を見出す確率は，d に到達したときに粒子線が拡がる面積に反比例する．同様に，粒子を b に見出す確率は $R_b^2 d\Omega$ に反比例する．$R_b^2 d\Omega$ は，散乱粒子線が標的から b に到達するまでに拡がってゆく面積である．これらの面積の比をとると，それぞれの場合に粒子を見出す確率の比の逆数となる．この観点からすると，標的の面積片 $d\sigma$ に衝突する粒子はすべて散乱され，ある特定の方向に偏向される，ということになる．もちろん，実際に標的に衝突して散乱される粒子は少数であり，そのうちのある部分だけが θ 方向に散乱されるのである．よって，この計算で用いられた面積要素 $d\sigma$ は，粒子が θ 方向に散乱される有効断面積を，散乱方向の立体角要素 $d\Omega$ で表したものである．

が原子の領域に厳密に局在していると考えられるのでもない．たとえば，古典的には標的の後方に陰があると期待されるが，古典的意味における（はっきりとした境界をもつものとして）陰はないのである．なぜならわれわれは波動現象を扱っているのだから，波動が陰の領域に回折する．

原子ポテンシャルの特別な形　原子ポテンシャルがさまざまな形 $V(\mathbf{r})$ をとる場合について得られる結果を以下の問題に示す．

問題 6 - 6　ポテンシャルが中心力 $V(\mathbf{r})=V(r)$ であるとする．ここで $r=|\mathbf{r}|$．$v(\mathbf{q})$ が

$$v(\mathbf{q})=v(q)=\frac{4\pi\hbar}{q}\int_0^\infty dr\ \ r\left(\sin\frac{qr}{\hbar}\right)V(r) \tag{6-45}$$

と書けることを示せ．ここで $q=|\mathbf{q}|$．

$V(r)$ が Coulomb ポテンシャル Ze^2/r であるとする．この場合 $v(q)$ に対する積

分は上限において振動的である．しかし人為的に因子 $e^{-\varepsilon r}$ を導入することにより積分を強制的に収束させその結果において $\varepsilon\to 0$ の極限をとる．この計算を実行することにより，この断面積が Rutherford 断面積

$$\sigma_{\mathrm{Ruth}}=\frac{4Ze^4m^2}{q^4}=\frac{Ze^4}{16(mu^2/2)^2[\sin(\theta/2)]^4} \tag{6-46}$$

に対応することを示せ．ここで

e は電子の電荷，$q=2p\sin(\theta/2)=2mu\sin(\theta/2)$，$\theta=$ベクトル $\mathbf{i}_a, \mathbf{i}_b$ の間の角度 (6-47)

である．

問題6-6の結果は偶然にも厳密である．すなわち，第 1 Born 近似が Coulomb ポテンシャル中の散乱確率に対して厳密な値を与える．しかしこのことは高次の項が 0 であるということではない．むしろ，高次の項は散乱振幅の位相にのみ寄与するのである．確率は振幅の絶対値の 2 乗であるから位相に依存しない．したがって第 1 Born 近似は確率を正しく与えるが振幅については厳密でない．この Coulomb 散乱の場合はおもしろい．というのはもう 1 つの偶然があるからである．この散乱問題を完全に古典的に扱っても，すなわち，電子を電荷をもつ質点として扱っても，同じ結果となる．

問題 6 - 7　ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ が電荷分布 $\rho(\mathbf{r})$ によって生じるものとして

$$\nabla^2 V(\mathbf{r})=4\pi e\rho(\mathbf{r}) \tag{6-48}$$

で与えられるとする．$\rho(\mathbf{r})$ が $|\mathbf{r}|\to\infty$ で 0 になると仮定し，(6-48) に $\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/\hbar)$ を掛け，$\mathbf{r}$ について 2 回積分することにより，$v(\mathbf{q})$ が ρ を用いて

$$v(\mathbf{q})=-\frac{4\pi\hbar^2e^2}{q^2}\int d^3\mathbf{r}\, e^{(i/\hbar)\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\rho(\mathbf{r}) \tag{6-49}$$

と表されることを示せ．

原子は電荷密度によって表される．核のところで電荷密度は特異的になり，強さ Z をもつ $\mathbf{r}$ の δ 関数として表される．ここで Z は核の電荷である．ρ_e が原子内の電子の密度であるとき，$v(\mathbf{q})$ は

$$v(\mathbf{q})=-\frac{4\pi\hbar^2e^2}{q^2}\left[Z-\int d^3\mathbf{r}\,\rho_e(\mathbf{r})e^{(i/\hbar)\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\right] \tag{6-50}$$

となる．括弧の中の量は電子散乱の形状因子と呼ばれる（ちなみに，X 線散乱でも似たような形状因子が現れる．X 線散乱の理論によると，散乱に寄与するのは原子

内電子だけであり，原子核は寄与しない．したがって X 線散乱の形状因子は Z が省略されるだけであとは同じである）．

原子内でポテンシャルは非常に小さい半径に対してのみ Coulomb の法則に従う．半径が大きくなると，原子内電子は核の電荷を遮蔽し打ち消すので，r が十分大きいとポテンシャルは 0 となる．原子内電子の遮蔽効果は非常に粗い近似で次の公式で表される．

$$V(r)=-\frac{Ze^2}{r}e^{-(r/a)} \tag{6-51}$$

この式で a は原子半径と呼ばれる．これは化学者が使う原子の外殻半径とは同じでなく，$a_0/Z^{1/3}$ で与えられる．ここで $a_0=\hbar^2/me^2=0.528\,\text{Å}$ である．

問題 6 - 8　(6-51) のポテンシャルの場合

$$v(q)=-\frac{4\pi Ze^2\hbar^2}{q^2+(\hbar/a)^2} \tag{6-52}$$

となり，したがって

$$\sigma=Z^2e^4\left\{\frac{mu^2}{2}\left[4\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)+\frac{\hbar^2}{(pa)^2}\right]\right\}^{-2} \tag{6-53}$$

であることを示せ．全断面積 σ_T は σ を単位球上で積分したものとして定義される．

$$\sigma_T=\int_0^{4\pi}\sigma d\Omega \tag{6-54}$$

今の例で σ_T が

$$\sigma_T=\pi a^2\frac{Z^2e^4/(2u\hbar)^2}{1+\hbar^2/(2pa)^2} \tag{6-55}$$

で与えられることを示せ．

問題 6 - 9　原子核が有限の半径

$$r=1.2\times10^{-13}\times(\text{質量数})^{1/3}\,\text{cm} \tag{6-56}$$

をもつことを考慮し，核電荷がこの半径の球の中に近似的に一様に分布しているものと仮定する．電子が非常に大きな運動量移動 q を伴って原子によって散乱されるとき，この仮定は断面積にどんな効果をもたらすか．

この効果を用いてどのようにしたら核半径および核の電荷密度の詳細が決定できるかを示せ．この効果を発揮させるには入射電子の運動量 p がどれほど大きくなければならないか．もっと注意深くすれば，大きな散乱角や小さい散乱角を観測でき

るであろうか．その理由も述べよ．

注意：このタイプの実験では，電子に必要な運動量は非常に大きいので，実際にエネルギーを求めるためには相対論的な式 $E=\sqrt{m^2c^4+c^2p^2}-mc^2$ を使わなければならない．したがって厳密にいうと，相互作用を記述するのに非相対論的な式を使ってはならない．しかしながら，運動量と波長との関係およびエネルギーと振動数との関係は相対論的領域でも変わらない．この「電子顕微鏡」の分解能を決めるのは波長であるから，非相対論的な式で計算された運動量はやはり正しい．

問題 6-10　2個の原子，A と B からなる2原子分子を考える．それぞれの中心の位置をベクトル $\mathbf{a}$ と $\mathbf{b}$ で表す．Born 近似を用いて，このような分子による電子の散乱振幅が

$$K^{(1)}=e^{(i/\hbar)\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}}f_A(\mathbf{q})+e^{(i/\hbar)\mathbf{q}\cdot\mathbf{b}}f_B(\mathbf{q}) \tag{6-57}$$

であることを示せ．ここで f_A と f_B はそれぞれの原子が座標系の原点にあるときの個別の散乱振幅である．原子の結合力は最外殻のわずかの電子にしか影響を与えないので，核の周囲の電荷分布はあまり変わらない（ただし水素のような非常に軽い核は例外である）．

(6-57) を用いて，ある特定の $\mathbf{q}$ の値に対する散乱確率が $f_A^2+f_B^2+2f_Af_B\cos(\mathbf{q}\cdot\mathbf{d})$ となることを示せ．ここで $\mathbf{d}=\mathbf{a}-\mathbf{b}$ である．

ボルン近似で計算された f の値は実数であり，この結果は分子による回折の実験で通常用いられる電子エネルギー（1keVの程度）に対して有効である．しかしながら分子がウラニウムのような非常に重い原子を含むときは，原子ポテンシャルは大きすぎて散乱結果は Born 近似で正しくは記述されず，小さな補正が必要となる．

問題 6-11　分子の向きがランダムであるとする．そのような一群の分子について電子散乱の平均をとったものは $f_A^2+f_B^2+2f_Af_B\sin(\mathbf{q}\cdot\mathbf{d})/(\mathbf{q}\cdot\mathbf{d})$ に比例することを示せ．この結果を多原子分子の場合に一般化するにはどうしたらよいか．

これらの結果は電子回折実験の基礎をなすものであり，分子の形を決めることを可能にする．

問題 6-12　$V(\mathbf{r})$ は時間に依存しないものとして，2次の散乱項 $K^{(2)}(b,a)$ の時間積分を行うと次の式が得られることを示せ．

$$K^{(2)}(b,a)=\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{3/2}\int d^3\mathbf{r}_c\int d^3\mathbf{r}_d\ \frac{r_{cd}+r_{ac}+r_{bd}}{r_{cd}r_{ac}r_{bd}}$$

$$\times \exp\left[\left(\frac{im}{2\hbar T}\right)(r_{cd}+r_{ac}+r_{bd})^2\right]V(\mathbf{r}_c)V(\mathbf{r}_d) \tag{6-58}$$

ここで4点 a，b，c，d は図6-9のような配置にある．記号 r_{cd} は点 c，d の間の距離である．r_{ac}，r_{bd} なども同様に定義される．

R_a, R_b に較べて短い距離のところで $V(\mathbf{r})$ が無視できるほどに小さくなるものとする．断面積が $\sigma=|f|^2$ で与えられることを示せ．ここで1次の項を含む散乱振幅 f は

$$f=\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3\mathbf{r}\,e^{-(i/\hbar)\mathbf{p}_b\cdot\mathbf{r}}V(\mathbf{r})e^{(i/\hbar)\mathbf{p}_a\cdot\mathbf{r}}$$
$$+\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\int d^3\mathbf{r}_c\int d^3\mathbf{r}_d\ \ e^{-(i/\hbar)\mathbf{p}_b\cdot\mathbf{r}_d}V(\mathbf{r}_d)\left(\frac{1}{r_{cd}}\right)$$
$$\times e^{(i/\hbar)pr_{cd}}V(\mathbf{r}_c)e^{(i/\hbar)\mathbf{p}_a\cdot\mathbf{r}_c}+(\text{高次の項}) \tag{6-59}$$

である．$\mathbf{p}_b$ は $\mathbf{R}_b$ の方向に進む電子の運動量であり，$\mathbf{p}_a$ は $-\mathbf{R}_a$ の方向に進む電子の運動量である．運動量の大きさは p であり，(比較的重い)原子による電子の弾性散乱において運動量は近似的に変化しない．

Born 近似が適切でない状況では，2次の項を補正として計算する価値があると思われるかも知れない．しかし実際上の応用では，(6-59)は一種の漸近級数のようである．2次の項が無視できないほどの補正を与える場合(10%以上)，高次の項がさらに小さいということにならず，この方法で正しい補正を求めることは困難であ

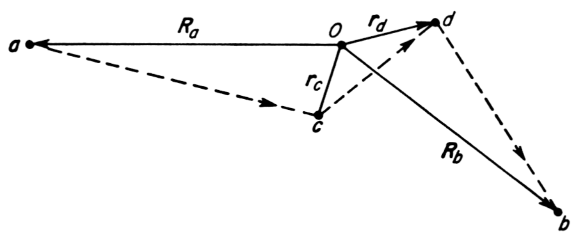


図6-9　散乱の計算の精度を上げるために，摂動展開の2次の項を考慮する．ここで，図6-2(3)と同様に,電子は原子ポテンシャルの中で2つの離れた点で散乱されるものとする．すなわち．電子は a から出発し，自由粒子として動いて c に到達する．c で散乱される．それから自由粒子として動いて d に到達し，そこでふたたび散乱される．最後に自由粒子として b まで動き，そこで計測器に集められる．2点 c，d は空間の任意の点でよい．これらの位置における原子ポテンシャルは，原子の中心 O からの動径ベクトル $\mathbf{r}_c$ と $\mathbf{r}_d$ に依存する．

る．もちろん Born 近似の誤差が小さい（1％以下）という問題ならば，2次の項は補正を与えるのに適切である．

波動関数による散乱の取り扱い　これまで述べてきた散乱実験において，入射電子の初期状態は運動量 $\mathbf{p}_a$ をもつ自由粒子の状態であると仮定した．また，運動量の値は飛行時間法によって決められると仮定した（すなわち，距離 R_a+R_b を飛ぶのに要する時間は T）．

この測定法を用いる必然性はない．運動量を決定することができる実験装置であればなんでもよい．したがって波動関数の方法によって，散乱現象の描像を一般化しよう．

入射電子が運動量 $\mathbf{p}_a$ とエネルギー $E_a=p_a^2/2m$ をもっていることがわかっているものとする．このとき入射電子の波動関数は

$$\phi_a=e^{(i/\hbar)\mathbf{p}_a\cdot\mathbf{r}}e^{-(i/\hbar)E_at} \tag{6-60}$$

である．(6-25)の初めの2項を用いると，放出電子に対する波動関数は1次までの近似で

$$\psi(\mathbf{R}_b, t_b)=e^{(i/\hbar)\mathbf{p}_a\cdot\mathbf{R}_b-(i/\hbar)E_at_b} \\ -\frac{i}{\hbar}\int_0^{t_b}dt\int d^3\mathbf{r}\ K_0(\mathbf{R}_b, t_b : \mathbf{r}, t)\,V(\mathbf{r}, t)e^{(i/\hbar)\mathbf{p}_a\cdot\mathbf{r}}e^{-(i/\hbar)E_at} \tag{6-61}$$

となる．この式の第1項は散乱されずにポテンシャル領域を通過した自由粒子の波動を表している．第2項は散乱電子の振幅である．この項を ψ_s と表すならば，ψ_s は散乱波である．

問題 6-13　$V(\mathbf{r}, t)$ が実際 t に依存しないとする．(6-61) の自由粒子核 K_0 に具体的な形を代入し，その結果を t について積分することにより，次式を示せ．

$$\psi(\mathbf{R}_b, t_b)=e^{-(i/\hbar)E_at_b}\left[e^{(i/\hbar)\mathbf{p}_a\cdot\mathbf{R}_b}+\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3\mathbf{r}_c\ \frac{1}{r_{bc}}e^{(i/\hbar)pr_{bc}}V(\mathbf{r}_c)e^{(i/\hbar)\mathbf{p}_a\cdot\mathbf{r}_c}\right] \tag{6-62}$$

ここで r_{bc} は最終点 b と途中の積分点 c との間の距離であり，p は電子の運動量の大きさである．

ここでも，R_a, R_b と比較して短い距離のところでポテンシャルが 0 になるものと仮定する．このとき (6-62) が次のように書けることを示せ．

$$\psi(\boldsymbol{R}_b, t_b)=e^{-(i/\hbar)E_at_b}e^{(i/\hbar)\mathbf{p}_a\cdot\mathbf{R}_b}+f\frac{e^{(i/\hbar)p\mathrm{R}_{bc}}}{R_b} \tag{6-63}$$

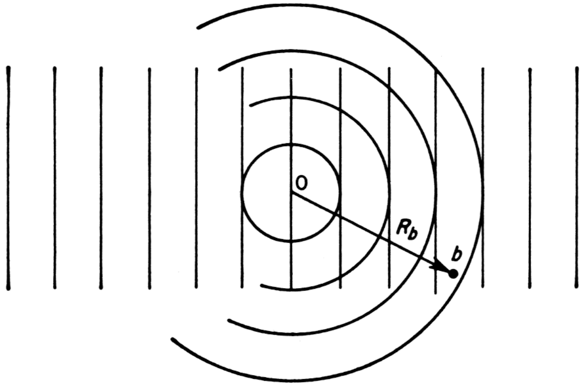


図6-10　電子線を等価な波動で表し，O にある原子核に向かって運動する様子を表す．電子線の中の最も強い部分は攪乱されずに運動量 p_a をもつ平面波として進行する．電子線の小さい部分は原子核によって散乱されて球面波の形で O から去ってゆく．その結果，ある点 b（原子核 O からの距離を R_b とする）における電子波の強度（電子数）は 2 つの部分からなる．1 つは，平面波 $\exp(i\mathbf{p}_a\cdot\mathbf{r}_b/\hbar)$ で与えられる非散乱電子線である．これに加わるのが，$(1/R_b)\exp(ipR_b/\hbar)$ という球面波の形に角度依存性を決める関数 f を乗じた散乱波である．これら 2 つの波を組みあわせると，散乱波の空間依存性が与えられる．

ここで散乱振幅 f は $v(\mathbf{q})$ を用いて定義される［(6-39) を見よ］．

$$f=\frac{m}{2\pi\hbar^2}v(\mathbf{q}),\quad \mathbf{q}=\mathbf{p}_a-\mathbf{p}_b \tag{6-64}$$

(6-63) の最後の項，$(f/R_b)\exp(ipR_b/\hbar)$ は散乱された波動関数の空間部分と考えることができる．散乱中心の原子から外向きに放射される球面波の形をしている．ある特定の散乱角度における球面波の振幅は，関数 f を通してその角度に依存する．関数 f は (6-64) により運動量移動 q によって変化する．散乱後の電子の完全な波動関数は 2 つの項からなるものと考えられる．図6-10に示すように，第 1 項は非散乱電子の平面波 $\exp(i\mathbf{p}\cdot\mathbf{R}_b/\hbar)$，第 2 項は散乱電子の球面波である．この観点を用いて断面積の式を導け．

問題 6-14　波動関数の方法を用いて，次のようなポテンシャルで表される正弦振動場による電子の散乱を論ぜよ．

$$V(r,t)=U(r)\cos\omega t \tag{6-65}$$

第 1 Born 近似で放射波のエネルギーが $+\omega$ か $-\omega$ だけ変化することを示せ．高次

の項はどうなるか．

6-5 時間による摂動と遷移振幅

遷移振幅 非摂動問題が時間によらないポテンシャル U に対応するとき，特に有用な摂動論の形式が得られる．このとき（4-59）で見たように非摂動核を非摂動問題の固有関数 ϕ_n と固有値 E_n を用いて展開することができる．

$$K_U(2,1)=\sum_n \phi_n(x_2)\phi_n^*(x_1)e^{-(iE_n/\hbar)(t_2-t_1)} \qquad [t_2>t_1] \tag{6-66}$$

K_U に対するこの表式を代入してから $K_V(2,1)$ の級数を見てみよう．初めの 2 項を書くと，次のようになる．

$$\begin{aligned}K_V(2,1)=&\sum_n \phi_n(x_2)\phi_n^*(x_1)e^{-(iE_n/\hbar)(t_2-t_1)}\\&-\frac{i}{\hbar}\sum_n\sum_m\int_{-\infty}^{\infty}dx_3\int_{t_1}^{t_2}dt_3\phi_m(x_2)\phi_m^*(x_3)V(x_3,t_3)\\&\times e^{-(iE_m/\hbar)(t_2-t_3)}\phi_n(x_3)\phi_n^*(x_1)e^{-(iE_n/\hbar)(t_3-t_1)}\end{aligned} \tag{6-67}$$

それぞれの項で x_1 が $\phi_n^*(x_1)$ のように波動関数の中に現れるのが明らかである．また x_2 も $\phi_m(x_2)$ に現れる．したがって K_V を常に次のような形に表すことができる．

$$K_V(2,1)=\sum_n\sum_m\lambda_{mn}(t_2,t_1)\phi_m(x_2)\phi_n^*(x_1) \tag{6-68}$$

ここで λ_{mn} は t_2，t_1 に依存する係数である．この係数を**遷移振幅**と呼ぶ．V の 0 次では K_V は K_U となり，$\lambda_{mn}=\delta_{mn}e^{-(iE_n/\hbar)(t_2-t_1)}$ となる．λ を V のべきで展開すると，

$$\lambda_{mn}=\delta_{mn}e^{-(iE_n/\hbar)(t_2-t_1)}+\lambda_{mn}^{(1)}+\lambda_{mn}^{(2)}+\cdots \tag{6-69}$$

が得られる．(6-67) と比較することにより，

$$\lambda_{mn}^{(1)}=-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dx_3\int_{t_1}^{t_2}dt_3\ \phi_m^*(x_3)V(x_3,t_3)\phi_n(x_3)e^{(i/\hbar)[E_m(t_3-t_2)-E_n(t_3-t_1)]} \tag{6-70}$$

が得られる．

問題 6-15 問題5-4において状態 $\psi(x)$ から状態 $\chi(x)$ への遷移確率としてある特別な積分を定義したことを思い起こそう．初期状態が固有関数 $\phi_n(x)$ で終状態が固有関数 $\phi_m(x)$ であるとき，λ_{mn} がこの定義を満たすことを示せ．

簡単のために次の量を定義する．

$$V_{mn}(t_3)=\int_{-\infty}^{\infty}dx_3\phi_m^*(x_3)\,V(x_3,\,t_3)\phi_n(x_3) \tag{6-71}$$

（これをしばしば状態 n と m の間の V の**行列要素**と呼ぶ．）このとき（6-70）は

$$\lambda_{mn}^{(1)}=-\frac{i}{\hbar}e^{-(i/\hbar)E_m t_2}e^{+(i/\hbar)E_n t_1}\int_{t_1}^{t_2}dt_3\,V_{mn}(t_3)e^{(i/\hbar)(E_m-E_n)t_3} \tag{6-72}$$

と表される．これは時間に依存する摂動論の重要な結果である．係数 λ_{mn} は，系が初期に状態 n にある場合に，時刻 t_2 において状態 m に見出される振幅である．

時刻 t_1 における波動関数が $\phi_n(x_1)$ であったとする．t_2 における波動関数はどうなるか．（3-42）を用いると，t_2 における波動関数は次のようになる．

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx_1\,K_V(2,1)\phi_n(x_1)=\sum_k\sum_l\lambda_{kl}\phi_k(x_2)\int_{-\infty}^{\infty}dx_1\,\phi_l^*(x_1)\phi_n(x_1)=\sum_k\lambda_{kn}\phi_k(x_2) \tag{6-73}$$

すなわち t_2 における波動関数は $\sum_m C_m\phi_m(x_2)$ という形になる．

固有関数によるこのような展開は（4-48）において初めて導入された．ここで定数 C_m にもっと深い意味付けをすることができる．C_m は系が状態 ϕ_m に存在する振幅であると解釈できる．上の特別の場合，$C_m=\lambda_{mn}$ は，t_1 において状態が ϕ_n であるとき t_2 において状態 ϕ_m に存在する振幅である．

ポテンシャルが作用していない場合，ひとたび状態 n にいた系はそのまま振幅を時間的に変化させながら同じ状態 n に留まる．したがって0次では

$$\lambda_{mn}=\delta_{mn}\ e^{-(iE_n/\hbar)(t_2-t_1)}$$

となる．1次の項は次のような規則によって解釈される（図6-11）：時間 dt 後に状態 n から m に散乱される振幅は $-(i/\hbar)V_{mn}(t)dt$ である．

問題 6-16　（6-71）を選択肢の和として解釈せよ．すなわち，それぞれの選択肢はどのような運動に対応するかを論ぜよ．

問題 6-17　各項の意味を説明することにより，式 (6-72) の意味付けをせよ．そして2次の係数に対する式

$$\lambda_{mn}^{(2)}=-\frac{1}{\hbar^2}\int_{t_1}^{t_2}dt_4\int_{t_1}^{t_4}dt_3\ \sum_k e^{-(i/\hbar)E_m(t_2-t_4)}V_{mk}(t_4)$$
$$\times e^{-(i/\hbar)E_k(t_4-t_3)}V_{kn}(t_3)e^{-(i/\hbar)E_n(t_3-t_1)} \tag{6-74}$$

の意味を明らかにしかつ確かめよ．

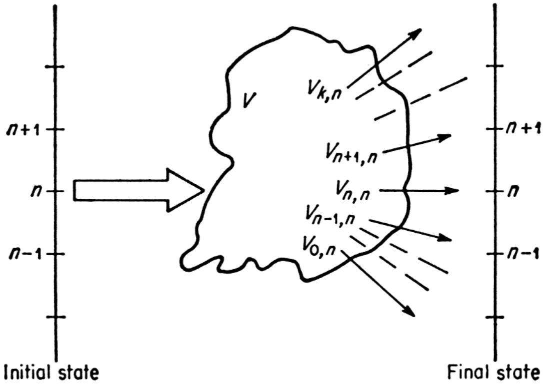


図6-11 初めに n 番目のエネルギー準位にある系がポテンシャルの影響を受けて，可能なあらゆる状態に「散乱」される．たとえば，k 番目の状態に散乱される振幅は V_{kn} に比例する．特に，時間 dt 後に状態 n から状態 m に散乱される振幅は $-(i/\hbar)V_{mn}(t)dt$ である．

問題 6 -18 次の積分方程式を導きかつ解釈せよ．

$$\lambda_{mn}(t_2, t_1)=\delta_{mn}\ e^{-(i/\hbar)E_m(t_2-t_1)}$$
$$-\frac{i}{\hbar}\int_{t_1}^{t_2}dt_3\ e^{-(i/\hbar)E_m(t_2-t_3)}\sum_k V_{mk}(t_3)\lambda_{kn}(t_3, t_1) \tag{6-75}$$

問題 6 -19 $\lambda_{mn}(t_2)$ を終時刻 t_2 の関数とみなし，(6-75) あるいは (6-69) を用いて次の式を導け．

$$\frac{d}{dt_2}\lambda_{mn}(t_2)=-\frac{i}{\hbar}\sum_k V_{mk}(t_2)\lambda_{kn}(t_2)-\frac{i}{\hbar}E_m\lambda_{mn}(t_2) \tag{6-76}$$

この結果の直接的な物理的解釈を与えよ．次に，この結果を Schrödinger 方程式から直接導け．ヒント：(6-73) を用い，Schrödinger 方程式に代入せよ．(6-76) と初期条件 $\lambda_{mn}(t_1)=\delta_{mn}$ を用いると λ が直接求められる．

(6-69) のすべての項は次の規則で解釈される．すなわち，$-(i/\hbar)V_{mn}(t)dt$ は時間間隔 dt の間にポテンシャルによって状態 n から状態 m に散乱される（遷移する）振幅である．状態 n から状態 m へ，0 回，1 回，2 回，…の散乱によって遷移が起こる．2 つの状態間を直接（すなわち散乱なしに）行くことができるのは $m=n$ のときのみであるから，第 1 項は δ_{mn} に比例する．

(6-72)で与えられる第2項は，単一の散乱の結果として生ずる遷移の振幅を与える．粒子が初期状態 n に見出される振幅は時刻 t_3 において $\exp[-iE_n(t_3-t_2)/\hbar]$ である（この場合「状態 n に見出される」というのは「ポテンシャル V による状態 n からの散乱が可能な」と解釈すべきである）．ポテンシャル V によって状態 n から状態 m に散乱される振幅は $-(i/\hbar)V_{mn}$ である．最後に時刻 t_2 において状態 m に見出される振幅（この場合，「散乱が起こったときに粒子にとって状態 m にあることが可能である振幅」という意味である）は $\exp[-iE_m(t_2-t_3)/\hbar]$ に比例する．この散乱は t_1 と t_2 の間の任意の時刻で起こり得る．したがってこれらの2つの端点の間で時刻 t_3 について積分を行う．

第3項は（6-74）で与えられ二重散乱すなわち2次の散乱の結果としての遷移の振幅である．第1の散乱によって，系は時刻 t_3 において初期状態 n から中間状態 k に遷移する．それから時刻 t_4 までこのままの状態に留まり，その振幅は指数関数 $\exp[-iE_k(t_4-t_3)/\hbar]$ で与えられる．時刻 t_4 でもう1つの散乱が起こり，系は状態 k から状態 n に遷移する．すべての可能な散乱時刻 t_4 と t_3 について積分する．その際の唯一の条件は時刻 t_3 は時刻 t_4 よりも早いということである．次に中間の時刻に系が散乱されて到達し得るすべての可能な状態 k について和をとる．

(6-69)の各項の解釈はすでに与えたが，これらは時間による摂動論の一般的結果を与える．非摂動系が一定のハミルトニアンをもつとき，すなわち一定のエネルギー固有値をもつとき（6-69）は適用可能である．次にこの理論の特別な場合についてもっと詳しく調べる．

1次遷移　まず，終状態 m が初期状態 n と異なる場合を考える．第1 Born 近似，すなわち（6-69）の第2項のみを考慮することにする．その結果は V が小さいとき有効である．n から m へ遷移する振幅は

$$\lambda_{mn}^{(1)}=-\frac{i}{\hbar}\int_{t_1}^{t_2}dt\ e^{(i/\hbar)(E_m-E_n)t}V_{mn}(t)e^{-(i/\hbar)(E_mt_2-E_nt_1)} \tag{6-77}$$

である．時間による摂動論においてこれは非常に重要な特別な公式である．第一の例として，$V(x,t)=V(x)$ が時間に陽に依存しない関数であるとする．時間間隔を0から T にとると，V_{mn} が一定であるから，次式が得られる．

$$\lambda_{mn}^{(1)}e^{(i/\hbar)(E_m(t_2-t_1))}=-\frac{i}{\hbar}V_{mn}\int_0^T dt\ e^{(i/\hbar)(E_m-E_n)t}=V_{mn}\frac{e^{(i/\hbar)(E_m-E_n)T}-1}{E_n-E_m} \tag{6-78}$$

したがって時間間隔 T の間の遷移確率は

$$P(n\to m)=|\lambda_{mn}^{(1)}|^2=|V_{mn}|^2\left[4\sin^2\frac{(E_n-E_m)T}{2\hbar}\right](E_n-E_m)^{-2} \tag{6-79}$$

である．少なくとも長い時間 T に対してこの確率はエネルギー差 E_n-E_m の関数として急激に振動することがわかる．E_n と E_m の差が無視できないほどであると，すなわち $|V_{mn}|\ll|E_m-E_n|$ のときに，この確率は非常に小さくなる．すなわち，非常に弱い一定の摂動に対して，終状態のエネルギーが初期状態のエネルギー値から大きくずれる確率は非常に小さいのである．次のような疑問が生じるかも知れない．小さい攪乱 V_{mn} の結果としてエネルギーが大きく変化して E_m-E_n の大きな値を得る可能性は全くないのであろうか．答えは次のようになる．われわれは V が時刻 $t=0$ において急激にスタートするものとした．初期時刻を特定したことにより，不確定性原理によってエネルギーに大きな不確定性が生じる［(5-19) および関連する議論を参照］．

問題 6 -20　V の開始と終了が緩慢であると仮定する．たとえば，$V(x,t)=V(x)f(t)$ とおき，$f(t)$ は図6-12に示すような滑らかな関数であるとする．

$$f(t)=\begin{cases}\dfrac{1}{2}e^{\gamma t} & t<0\\[2mm] 1-\dfrac{1}{2}e^{-\gamma t} & 0<t<\dfrac{T}{2}\\[2mm] 1-\dfrac{1}{2}e^{-\gamma(T-t)} & \dfrac{T}{2}<t<T\\[2mm] \dfrac{1}{2}e^{-\gamma(t-T)} & t>T\end{cases} \tag{6-80}$$

$1/\gamma$ は関数 $f(t)$ が立ち上がる時間を与えるが，これに対して $1/\gamma\ll T$ を仮定し，さらに $\gamma\ll(E_m-E_n)$ を仮定する．(6-79) で与えられる確率は因子 $\{\gamma^2/[\gamma^2+(E_m-E_n)^2]\}^2$ だけ減少することを示せ．この $f(t)$ の定義において，時間についての 2 次の導関数に不連続がある．関数をもっと滑らかにするとさらに確率は減少する．

E_n と E_m が厳密に同じエネルギーであるということが起こると，$P(n\to m)=|V_{mn}|^2 T^2/\hbar^2$ が得られる．これは時間の 2 次で増加する．この場合，単位時間当たりの遷移確率という考えは意味をなさなくなる．この式は T が十分小さくて $V_{mn}T\ll\hbar$ で

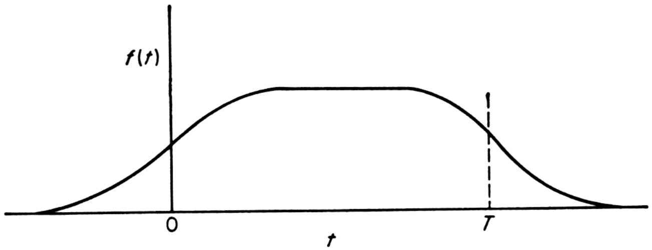


図6-12　m から n への遷移を起こすポテンシャルが，ここに示すような時間変化 $f(t)$ でゆっくりと増加し，そして減少する．この時間因子が滑らかになればなるほど（たとえば，不連続性が現れるのが高次の微分になる），遷移確率は小さくなる．

あるときのみ正しい．実際，厳密に同じエネルギーの 2 つの状態が摂動を受けている場合，第 1 の状態に見出される確率は $\cos^2(|V_{mn}|T/\hbar)$ のように変化し第 2 の状態に見出される確率は $\sin^2(|V_{mn}|T/\hbar)$ のように変化する．上の式はこれに対する第 1 近似となっている．

問題 6 -21　摂動ポテンシャル V が 2 つの準位 1 と 2 の間のみ行列要素をもつという特別な場合を考えよう．さらにこの 2 つの準位は縮退しているものとする．すなわち $E_1=E_2$，$V_{12}=V_{21}=v$ とおき，V_{11}，V_{22} および他の V_{mn} はすべて 0 であるとする．次の式を導け．

$$\lambda_{11}=1-\frac{v^2T^2}{2\hbar^2}+\frac{v^4T^4}{24\hbar^4}-\cdots=\cos\frac{vT}{\hbar} \tag{6-81}$$

$$\lambda_{12}=-i\frac{vT}{\hbar}+i\frac{v^3T^3}{6\hbar^3}-\cdots=-i\sin\frac{vT}{\hbar} \tag{6-82}$$

問題 6 -22　問題6-21において $V_{12}=V_{21}$ であるから V_{12} は実数である．V_{12} が複素数でも物理的結果は同じであることを示せ（$v=|V_{12}|$ とおけ）．

このような系は一方の状態から他方の状態へ行ったり来たりする．この結果からさらにもう 1 つの結論を導くことができる．摂動が極端に長い時間の間作用するものとする．すなわち $V_{mn}T/\hbar\gg1$．このとき系を任意の時刻 T（これはある程度不定）において調べるとすると，第 1 の状態にある確率と第 2 の状態にある確率は平均して等しくなる．すなわち，2 つの同じエネルギーの状態の間で小さい不定の摂動が

非常に長い時間作用すると，２つの状態は等確率で実現する．このことは第10章で統計力学の理論を述べる際に有用である．

非常に重要な場合は，終状態のエネルギー E_m としてとり得る値が孤立的あるいは離散的でなく連続スペクトルをなす場合あるいは極端に密接している場合である．E と dE の間のエネルギー域にある状態の数を $\rho(E)dE$ とする．この連続スペクトル中のある状態に遷移する確率を求めることができる．まず E_n-E_m が非常に大きいような遷移は非常に起こりにくいことがわかる．もっとも可能性のあることは，終状態はもとのエネルギーとほぼ同じエネルギーの状態である場合である（$\pm V_{mn}$ の誤差範囲で）．いずれかの状態に遷移するという確率全体は次のようになる．

$$\sum_{m=1}^{\infty} P(n\rightarrow m)=\sum_{m=1}^{\infty}|V_{mn}|^2\frac{4\sin^2[(E_m-E_n)T/2\hbar]}{(E_m-E_n)^2}$$

$$\simeq\int dE_m\rho(E_m)|V_{mn}|^2\frac{4\sin^2[(E_m-E_n)T/2\hbar]}{(E_m-E_n)^2} \qquad (6\text{-}83)$$

図6-13に示すように $E_m\sim E_n$ のとき $\{4\sin^2[(E_m-E_n)T/2\hbar]\}/(E_n-E_m)^2$ は非常に大きくなり最大値は $T^2/\hbar^2$ となる．E_m と E_n の差が大きくなると（$\hbar/T$ と比較して）これはずっと小さくなる．よって E_m についての積分への寄与の大部分は E_n の近傍のところからくる．

もし V_{mn} があまり急激な変化をせずこれをある典型的な値で置き換えることが

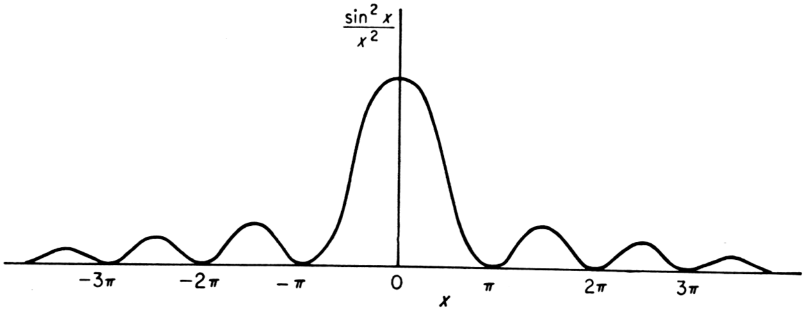


図6-13 この図で，エネルギー差 E_m-E_n は変数 x で置き換えてある．これらのエネルギーがほぼ等しいとき(つまり x が非常に小さいとき)，関数 $(\sin^2 x)/x^2$ は最大値をとる．エネルギー差が大きいと，この関数は非常に小さくなる．よってこの関数を含む表式で，もっとも重要な寄与は中央の領域から来る．すなわち，２つのエネルギーがほぼ等しい領域から来るのである．

できるならば，またさらに，$\rho(E_m)$ も同様に急激な変化をしなければ，非常によい近似で（6-83）の積分を次の式で置き換えることができる．

$$4|V_{mn}|^2\rho(E_n)\int dE_m \frac{\sin^2[(E_m-E_n)T/2\hbar]}{(E_m-E_n)^2} \tag{6-84}$$

$\int_{-\infty}^{\infty}[(\sin^2 x)/x^2]dx=\pi$ であるから，(6-84)の積分は $\pi T/2\hbar$ という値をもつ．よって連続スペクトル中のある状態への遷移確率は

$$P(n\to m)=2\pi|V_{mn}|^2\frac{\rho(E_n)T}{\hbar} \tag{6-85}$$

となり，終状態のエネルギーは始状態のエネルギーと同じである．

これらの結果から，単位時間当たりの遷移確率を次のような形に表すことができる．

$$\frac{dP(n\to m)}{dt}=\frac{2\pi}{\hbar}|M_{n\to m}|^2\rho(E) \tag{6-86}$$

ここで $M_{n\to m}$ は**遷移の行列要素**と呼ばれ，$\rho(E)$ は終状態の状態密度である．今の場合，$M_{n\to m}$ は V_{mn} である．λ_{mn} の高次の展開をすると，もっと複雑になる．別の表し方をすると，状態 n からある特定の状態 m への単位時間当たりの遷移確率を

$$\frac{dP(n\to m)}{dt}=\frac{2\pi\delta(E_n-E_m)|M_{n\to m}|^2}{\hbar} \tag{6-87}$$

と表すことができる．一群の状態 m についての積分を行うとき，$E_n=E_m$ であるような状態のみが残る．$\sum_m\to\int dE_m\rho(E_m)$ であるから，（6-86）の結果が得られる．

前に別の観点（すなわちポテンシャル中の電子の散乱という観点）から議論した例（6-4節参照）によって，（6-86）を説明することができる．中心力ポテンシャルとのみ相互作用している粒子を考える．粒子がある特定の運動量をもつ初期状態から散乱されて別の特定の運動量をもつ終状態に移る過程を議論しよう．初期状態 n は運動量 $\mathbf{p}_1$ の平面波であり波動関数 ϕ_n は $\exp(i\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{r}/\hbar)$（単位体積について ϕ_n の絶対値の2乗を積分したものが1となるように規格化する）であるとする．同様に終状態は運動量 $\mathbf{p}_2$ の平面波であり，波動関数 ϕ_m は $\exp(i\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{r}/\hbar)$ であるとする．行列要素 V_{mn} は

$$\begin{aligned}V_{mn}&=\int d^3\mathbf{r}\ e^{-(i/\hbar)\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{r}}V(\mathbf{r})e^{(i/\hbar)\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{r}}\\&=v(\mathbf{q})\end{aligned} \tag{6-88}$$

である．ここで $\mathbf{q}=\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2$ である．散乱においてエネルギーは保存するので $\frac{p_2^2}{2m}=\frac{p_1^2}{2m}$ が成り立つ．このことから運動量 $\mathbf{p}_1$ と $\mathbf{p}_2$ の絶対値が等しいことがわかる．これらの値を p とおこう．

$$|\mathbf{p}_2|=|\mathbf{p}_1|=p$$

運動量の微分要素の書き方の通常の習慣に従うと，運動量空間の体積要素 $d^3\mathbf{p}_2$ にある状態の数は $d^3\mathbf{p}_2/(2\pi\hbar)^3=p^2dpd\Omega/(2\pi\hbar)^3$ である．ここで $d\Omega$ は運動量ベクトル $\mathbf{p}_2$ を含む立体角の要素である．エネルギー領域の要素 dE は運動量空間の要素と次のような関係にある．

$$dE=d\left(\frac{p^2}{2m}\right)=\frac{pdp}{m} \tag{6-89}$$

立体角 $d\Omega$ の方向に飛行する粒子の状態密度は

$$\rho(E)d\Omega=\frac{1}{dE}\frac{d^3\mathbf{p}_2}{(2\pi\hbar)^3}=\frac{mpd\Omega}{(2\pi\hbar)^3} \tag{6-90}$$

である．これらの関係を(6-86)に代入すると 1 秒当たり立体角 $d\Omega$ 内に遷移する確率が

$$\frac{dP}{dt}d\Omega=\left(\frac{1}{2\pi\hbar^2}\right)^2 mpd\Omega|v(\mathbf{q})|^2 \tag{6-91}$$

で与えられることがわかる．

立体角 $d\Omega$ への散乱に対する標的の有効面積すなわち有効断面積を $d\sigma$ とする（6-4節参照）．毎秒この面積に衝突する粒子の数は断面積に入射粒子の速度 $u_1=p_1/m$ を掛けたものである．なぜなら，単位体積で規格化された波動関数 ϕ_n から出発したからである．すなわち，どの単位体積においても 1 個の粒子を見出す相対確率は 1 である．よって

$$\frac{dP}{dt}d\Omega=u_1d\sigma=\frac{p_1}{m}d\sigma \tag{6-92}$$

となり，断面積に対して次の結果が得られる．

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2|v(\mathbf{q})|^2 \tag{6-93}$$

これはまさに（6-44）で得たものである．

問題 6-23　任意の体積 V に対して確率 1 を与えるように波動関数が規格化されて

いる場合でも，$d\sigma/d\Omega$ に対して同じ結果が得られることを示せ．

問題 6-24　ポテンシャル V が時間の周期関数であるとする．たとえば，$V(x,t)=V(x)(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t})$ であるとする．終状態が次の2つの状態のうちのいずれでもない場合，遷移が起こる確率は小さいことを示せ．ここで2つの状態は

(1)　$E_{\text{終状態}}=E_{\text{初期状態}}+\hbar\omega$（エネルギーの吸収に対応する）

(2)　$E_{\text{終状態}}=E_{\text{初期状態}}-\hbar\omega$（エネルギーの放出に対応する）

である．これは，公式 (6-86) は変化しないが，エネルギー密度 $\rho(E)$ は E のこれらの終状態での値で計算しなければならないことを意味する．すなわち，(6-87) との類推により，

$$\frac{dP(n\to m)}{dt}=\frac{2\pi}{\hbar}|M_{n\to m}|^2[\delta(E_m-E_n-\hbar\omega)+\delta(E_m-E_n+\hbar\omega)] \qquad (6\text{-}94)$$

が得られる．

問題 6-25　電磁気学の方程式も，力学の方程式と同様に，光電効果を基礎として量子化した形に変換されなければならない，と議論されてきた．ここでエネルギー $\hbar\omega$ の電子は金属の薄膜から振動数 ω の光の作用によりときどき放射される．物質が量子力学に従う一方で光が連続的波動として表現されるときこのことは不可能であろうか．問題6-24の結果を見て，電磁気学の古典的記述を放棄することの必要性についてどのような議論を示すことができるか．

問題 6-26　二つの離散的エネルギー準位 E_1, E_2 があっていずれも連続準位に属さないものとする．$V(x,t)=V(x)f(t)$ という形のポテンシャルによって遷移が起こるものとする．遷移の確率が

$$P(1\to 2)=|V_{12}|^2|\phi(\omega_0)|^2 \qquad (6\text{-}95)$$

であることを示せ．ここで $f(t)$ はフーリエ変換

$$f(t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\ \ \phi(\omega)e^{i\omega t} \qquad (6\text{-}96)$$

で表され $\omega_0=(E_2-E_1)/\hbar$ である．

$f(t)$ が雑音理論においてよく知られている統計的に不規則な関数であるとき（これは濾過白色雑音と呼ばれる），逆変換

$$\phi(\omega)=\int_{-T}^{T}dt\ f(t)e^{-i\omega t} \qquad (6\text{-}97)$$

で与えられる $\phi(\omega)$ の値は時間 t の積分範囲 T に依存する．T が非常に大きいと

き，$|\phi(\omega_0)|^2$ は T に比例することがわかる．このようにして得られる遷移確率は時間に比例し，また振動数 ω_0 における単位振動数領域当たりの「強度」あるいは「パワー」(毎秒当たりの f の 2 乗平均)に比例する．このことより，光の連続スペクトル中における原子の遷移の確率は次の 2 つの量に比例する．

(1) 露出時間

(2) 振動数$(E_2-E_1)/\hbar$の吸収光の強度

高次の項 摂動展開における 2 次の項を見ることは興味深い．この項は注目する特定の状態 m と n に対して $V_{mn}=0$ であるような問題において，この 2 次の項は特に重要となる．このような問題があるとして，$V_{km}\neq 0$ となるような状態 $k\neq m$ が他にあると仮定する．1 次の項は 0 であり，$n\neq m$ であるかぎり，0 次の項もまた 0 である．したがって，遷移振幅の計算に入ってくる最低次の項は 2 次である．

ポテンシャル V が t に依存しないものとする．このとき遷移要素の 2 次の項は $\lambda_{mn}^{(2)}$ である．$T=t_2-t_1$ ならば (6-74) より次式が得られる．

$$
\begin{aligned}
e^{+(i/\hbar)E_m(t_2-t_1)}\lambda_{mn}^{(2)} &= -\frac{1}{\hbar^2}\sum_k V_{mk}V_{kn}\int_0^T dt_4\int_0^{t_4} dt_3\ e^{(i/\hbar)(E_m-E_k)t_4}e^{(i/\hbar)(E_k-E_n)t_3} \\
&= \frac{i}{\hbar}\sum_k V_{mk}V_{kn}\int_0^T dt_4\ e^{(i/\hbar)(E_m-E_k)t_4}\,\frac{e^{(i/\hbar)(E_k-E_n)t_4}-1}{E_k-E_n} \\
&= \sum_k \frac{V_{mk}V_{kn}}{E_k-E_n}\left(\frac{e^{(i/\hbar)(E_m-E_n)T}-1}{E_m-E_n}-\frac{e^{(i/\hbar)(E_m-E_k)T}-1}{E_m-E_k}\right) \qquad (6\text{-}98)
\end{aligned}
$$

この結果の最後の因子における 2 つの項のうち初めの項は 1 次の結果で見たのと同じ時間依存性をもつ．したがって，当面 2 番目の項を無視すると，結果は前と同じように $E_m=E_n$ を満たす状態間のみ遷移が起こることになり，その確率は T に比例する．単位時間当たりの確率は (6-86) と同様な形であり $M_{n\to m}$ を

$$
M_{n\to m}=\sum_k \frac{V_{mk}V_{kn}}{E_k-E_n} \qquad (6\text{-}99)
$$

で置き換えたものになっている．状態が連続スペクトルの中にあるものとすると，和は積分となる．1 次の遷移で状態 m にだけでなく初期状態と同じエネルギーの状態 k にも遷移しないという状況において (6-99) は正しい．このような状況では $E_k=E_n$ なる状態間に対して $V_{kn}=0$ である．このとき (6-98) の第 2 項は決して大きくならない．なぜなら E_n-E_k がほぼ 0 でないかぎり，この項は大きくなり得ないが，$E_n-E_k\approx 0$ のとき分子の V_{kn} は 0 となる．すべての効果は第 1 項からくるの

で，(6-99) は正しい．さらに (6-98) の k についての和において，$E_k=E_m$ のところでの極に曖昧さはない．なぜなら分子も同じ $E_k=E_m$ のところで 0 となるからである．

一方，ある他の連続状態への 1 次遷移が可能となる状況がある（たとえば，原子核が 2 つ以上の方法で崩壊する場合である）．このような場合，(6-99) の和は意味をもたなくなる．なぜなら極の近傍でなにをすべきかを定義しなければならないからである．ここでこの困難を解決するために登場するのが (6-98) で無視されていた第 2 項であり，$M_{n\to m}$ に対する正しい式が $\varepsilon\to 0$ の極限で

$$M_{n\to m}=V_{mn}+\sum_k \frac{V_{mk}V_{kn}}{E_k-E_n-i\varepsilon} \tag{6-100}$$

となる．この導出を次に解析する．

まず，T が大きいとき，E_n と E_m が事実上等しい（$\hbar/T$ の誤差で）のでなければ，T に比例する大きな遷移確率が得られないことに注意しよう．(6-98)の第 1 項についてはこれは明らかである．第 2 項については $E_k\approx E_m$ のときのみ大きな振幅が得られる．しかし E_m が E_n にあまり近くなければ，最初の因子は E_m の近くの E_k に対して滑らかな関数である．$E_k=E_m$ の近傍の小さい領域に対してこの因子がほぼ定数であるとすると，第 2 項は

$$\frac{e^{(i/\hbar)\varepsilon T}-1}{\varepsilon}d\varepsilon$$

を定数倍したものとして近似される．ここで $\varepsilon=(E_m-E_k)$ は小領域（$-\delta$ から $+\delta$ まで）で積分される．しかしながら

$$\int_{-\delta}^{\delta}\frac{e^{(i/\hbar)\varepsilon T}-1}{\varepsilon}d\varepsilon=\int_{-\delta T/\hbar}^{\delta T/\hbar}\frac{e^{iy}-1}{y}dy=\int_{-\delta T/\hbar}^{\delta T/\hbar}\left(\frac{\cos y-1}{y}+\frac{i\sin y}{y}\right)dy \tag{6-101}$$

第 1 の積分は奇関数の積分であるから 0 となる．第 2の積分は $T\to\infty$（したがって $\delta T/\hbar\to\infty$）で，ある有限の極限に収束する．すなわち，

$$2i\int_0^{\infty}\frac{\sin y}{y}dy=2\pi i\,.$$

よって大きな遷移確率は生じない．大きな効果は E_n と E_m が本質的に等しいときのみ生じる．このとき $(E_k-E_n)^{-1}$ と $(E_m-E_k)^{-1}$ による 2 つの極が一致するので第 2 項が重要となる．したがって，E_m と E_n がほとんど等しいとして解析を続ける．

非常に小さいエネルギー幅 $\varDelta$ を選ぶことにより，(6-98)の k についての和を 2 つの部分に分けることができる．$|E_k-E_n|\geq\varDelta$ を満たす部分を A とし，$|E_k-E_n|<\varDelta$

を満たす部分を B とする．E_k が E_n の近傍の幅 $2\varDelta$ の領域で変化したときに因子 $V_{mk}V_{kn}$ があまり変化しないように，$\varDelta$ の値を十分小さくとる．このエネルギー幅はある有限の大きさで，時間 T を十分大きくとったときに $\hbar/T \ll \varDelta$ が成り立つようにする．これは $|E_n-E_m| \ll \varDelta$ を意味する．

まず，A について考えよう．$|E_k-E_m| \geq \varDelta$ であるから (6-98) の第2項は大きくなりえない．極を避けるからである．第1項のみが寄与し，その値は

$$a\frac{e^{ix}-1}{x}\frac{T}{\hbar} \tag{6-102}$$

と表される．ここで $x=(E_m-E_n)T/\hbar$，および

$$a=\sum_k^{(A)}\frac{V_{mk}V_{kn}}{E_k-E_n}$$

である．E_m のまわりで $\pm\varDelta$ の幅の外側のすべての E_k について和をとる．この和は $\varDelta$ にほぼ独立で $\varDelta\to 0$ としたとき主値積分の定義を与える．すなわち，$\varDelta\to 0$ の極限で次のように書くことができる．

$$a=V_{mn}+\sum_k V_{mk}V_{kn}\mathrm{P.P.}\frac{1}{E_k-E_n} \tag{6-103}$$

ここで P.P. は主値部分を意味する．1次の項は，0 でない場合のことを考えて残しておく．

B の領域について，$E_k-E_m=0$ の近傍で $V_{mk}V_{kn}$ は一定であるとする．すなわち，$\sum_k^{(B)} V_{mk}V_{kn}F(E_k)$ を次式で置き換える．

$$\left[\sum_k V_{mk}V_{kn}\delta(E_k-E_m)\right]\int_{E_m-\varDelta}^{E_m+\varDelta}F(E_k)dE_k \tag{6-104}$$

これを bI と書く．ここで

$$b=\sum_k V_{mk}V_{kn}\delta(E_k-E_m) \tag{6-105}$$

$$I=\int_{E_m-\varDelta}^{E_m+\varDelta}\frac{dE_k}{E_k-E_n}\left(\frac{e^{(i/\hbar)(E_m-E_n)T}-1}{E_m-E_n}-\frac{e^{(i/\hbar)(E_m-E_k)T}-1}{E_m-E_k}\right) \tag{6-106}$$

次に $(E_m-E_n)(T/\hbar)=x$, $(E_k-E_n)(T/\hbar)=y$ とおくと，$(E_m-E_k)(T/\hbar)=x-y$ となり，次式が得られる．

$$I=\frac{T}{\hbar}\int_{-\varDelta T/\hbar}^{\varDelta T/\hbar}\frac{dy}{y}\left(\frac{e^{ix}-1}{x}-\frac{e^{i(x-y)}-1}{x-y}\right) \tag{6-107}$$

この積分は y を複素数とみなし，積分路を変えることにより容易に求められる．$-\varDelta T/\hbar$ から $\varDelta T/\hbar$ までの直線上で積分する代わりに実軸の下の半径 $\varDelta T/\hbar$ の半

円上で積分する．$\Delta T/\hbar$ は非常に大きいので，第2項の寄与は無視できるほどに小さい．この積分路上では

$$\int_{-\Delta T/\hbar}^{\Delta T/\hbar} \frac{dy}{y} = i\pi$$

であるから，$I = i\pi(T/\hbar)(e^{ix}-1)/x$ が得られる．部分 A と部分 B とを合わせると，振幅に対して

$$(a+i\pi b)\frac{(e^{ix}-1)T}{x\hbar} \tag{6-108}$$

が得られる．これより（6-86）の形の遷移確率が得られ，

$$M_{n\to m} = a + i\pi b = V_{mn} + \sum_k V_{mk}V_{kn}\left[\mathrm{P.P.}\frac{1}{E_k - E_n} + i\pi\delta(E_k - E_n)\right] \tag{6-109}$$

である．(6-100) のように，$\varepsilon \to 0$ の極限で，最後の括弧の中は $(E_k - E_m - i\varepsilon)^{-1}$ と表される．

(6-100) からわかることは次のようなことである．n から m への直接的遷移が可能でない場合でも，**仮想状態**と呼ばれるものを経由して遷移することが可能である．すなわち，系は n から k へ行き，そして k から m へ行くものと想像してよい．間接的遷移過程の振幅は（6-99）で与えられる．系が実際に中間状態 k を経過すると考えるのは正しくなく，量子力学に特徴的なこととして，いくつかの中間状態 k を経過する振幅があって，それらの寄与が干渉を起こすと考えられるのである．

中間状態のエネルギーは初期状態・終状態のエネルギーと異なる．中間状態は永久に占有されているのでないから，エネルギー保存則は破れていない．和に対する寄与はこのエネルギー差に反比例する．

この中間状態について絶対的な意味はなにもない．なぜなら V を系 H に対する摂動とみなすことによって生じるのであり，また $H+V$ に対する真の状態を H の固有状態で表現することによるからである．「非摂動」問題と「摂動」とをどのように分離するかによって，異なる式や中間状態が記述の中に現れる．

ポテンシャルが時間によるとき(たとえば，周期的に)，たくさんの興味ある効果が現れる．これらの多くはマイクロ波の実験で観測される．この場合，摂動 $V(x, t)$ は周期的に時間変化する弱い電場あるいは磁場である．

問題 6-27　周期的に時間変化するポテンシャルについて2次までの摂動展開を導け．

2つ以上の中間仮想状態を用いないと遷移が起こらない場合がある．このような

遷移を調べるには摂動展開で3次と4次の項を計算しなければならない．

問題6-28　直接的遷移あるいは1つの中間状態を経由する遷移が不可能であり，2つの中間状態を必要とするとき，この遷移が次の行列によって決められることを示せ．

$$M_{n\to m}=\sum_{k}\sum_{l}\frac{V_{mk}V_{kl}V_{ln}}{(E_m-E_k)(E_m-E_l)} \tag{6-110}$$

これは摂動展開の3次の項に対応する．

問題6-29　2つの摂動 $V(x,t)$，$U(x,t)$ が作用しているものとする．たとえば，直流と交流の電場の組み合わせや電場と磁場の組み合わせを考えてもよい．さらにある遷移は V あるいは U の一方だけでは起こらず双方が一緒に作用しているときのみ起こるものとする．V と U がともに時間によらないという特別の仮定をしたとき，遷移要素を決める行列要素が

$$M_{n-m}=\sum_{k}\frac{V_{mk}U_{kn}+U_{mk}V_{kn}}{E_k-E_m} \tag{6-111}$$

で与えられることを示せ．

次にポテンシャルがともに周期的に時間変化しその振動数 ω_1，ω_2 が異なるとき，行列要素はどうなるか．

状態のエネルギー変化の計算　遷移振幅を計算する際に，$n\neq m$ なる状態だけを考えてきた．われわれの注意を $m=n$ なる項に向けることにしよう．摂動展開で0次と1次の項を考えると，

$$\lambda_{mm}=1-\frac{i}{\hbar}\int_0^T dt V_{mm}(t) \tag{6-112}$$

が得られる．V が時間によらないならば，これから $1-(i/\hbar)V_{mm}T$ が得られる．この結果の意味はなにか．もとのハミルトニアンにポテンシャル V を付け加える結果として，系のすべての状態のエネルギーが微かに変化することが期待される．状態 m の新しいエネルギーを $E_m+\Delta E_m$ と表すことができる．この状態を表す波動関数の時間に依存する部分はもとの関数 $\exp[(-i/\hbar)E_m t]$ の代わりに $\exp[(-i/\hbar)(E_m+\Delta E_m)t]$ となる．

摂動ポテンシャルが作用している時間周期 T の間に，この相対的位相差によって次の因子が生じる．

$$\exp[(-i/\hbar)\Delta E_m T]$$

この因子を時間の1次まで展開すると，$1-(i/\hbar)\Delta E_m T$ が得られる．このようにして摂動 V による状態 m のエネルギー変化を1次まで計算すると

$$\Delta E_m = V_{mm} \tag{6-113}$$

が得られる．

1次のエネルギー変化のこの導出は，系が縮退しているときすなわち厳密に同じエネルギーの状態が初めにたくさんあるとき不満足である．このような場合 V の2次の項は同じく大きな効果をもつ．

遷移要素に対する摂動展開の2次の項を加えると

$$e^{(i/\hbar)E_mT}\lambda_{mm} = 1 - \frac{i}{\hbar}V_{mm}T - \left(\frac{1}{\hbar}\right)^2 \sum_k \int_0^T dt_4 \times \int_0^{t_4} dt_3 \; e^{-(i/\hbar)(E_k-E_m)(t_4-t_3)} V_{mk}V_{km} \tag{6-114}$$

が得られる．当面，縮退はないものと仮定しよう．2次の項にある級数の中の $k=m$ の項を考えよう．この特別の項についての積分はちょうど $T^2/2$ となる．$k \neq m$ の項についての積分は容易に行うことができ，次の結果が得られる．

$$e^{(i/\hbar)E_mT}\lambda_{mm} = 1 - \frac{i}{\hbar}V_{mm}T - \frac{1}{2\hbar^2}V_{mm}^2T^2 - \sum_{k\neq m}\frac{i|V_{km}|^2}{(E_m-E_k)\hbar}\left\{T - \frac{1-\exp[-iT(E_k-E_m)/\hbar]}{(i/\hbar)(E_k-E_m)}\right\} \tag{6-115}$$

この式の右辺の初めの3つの項は $\exp(-iV_{mm}T/\hbar)$ を2次まで展開したものを表している．和の中の第1項は T に比例しており，2次のエネルギー変化として解釈できる．すなわち，エネルギーの増分は V_{mm} だけでなく高次の補正を含んでいる．摂動エネルギーの二次までのエネルギー補正を書き下すと

$$\Delta E_m \doteq V_{mm} - \sum_{k\neq m}\frac{V_{mk}V_{km}}{E_m-E_k} \tag{6-116}$$

となる．

この最後の式は非縮退状態のエネルギー変化に対して2次まで正しい表式を与える．この結果は通常の方法すなわち次の方程式の解を求める方法によってもっと容易に得られる．

$$(H+V)\phi = E\phi \tag{6-117}$$

さらに(6-117)に基づく通常の方法では，縮退した状態も扱うことができる．しかしながら，エネルギー変化を計算するための簡単な公式を示すことよりも遷移振幅を使う方法の例を示すのがここでの目的であった．

実際，エネルギーの増分を求めるもっと複雑な問題では，遷移振幅の方法がもっとも簡単であることがある．そのような応用においては，上に示そうとしたように，級数の各項を T，T^2 などに比例するものとして同定するのである．そのとき，初期状態に留まる振幅が $\exp(-i\Delta ET/\hbar)$ に比例することを考慮し，この指数関数の級数展開が摂動の級数展開と同等であることを考慮すると，ΔE に対する正しい式が得られる．

(6-115)の最後の項はまだ議論していない．状態 E_k が連続スペクトルの中にあるとき，(6-116)の和の中の逆数の特性を定義しなければならない．$n\neq m$ に対する 2 次までを解析したときにわかったように，これが主値を意味するものとすれば，この付加項は T に比例する効果を作りだし次の形の補正を（6-116）に加えることがわかる．

$$\Delta' E_m = -i\pi\sum_k \delta(E_m - E_k) V_{mk} V_{km} \tag{6-118}$$

しかしこれはエネルギーの補正を表さない．なぜなら純虚数だからである．これを $-i\gamma/2$ と書こう（1/2は後の便利のためである）．

$$\Delta E_m - \frac{i\gamma}{2} = V_{mm} - \sum_k \frac{|V_{mk}|^2}{E_m - E_k - i\varepsilon} \tag{6-119}$$

このことから長時間の後，m 番目の状態にある遷移振幅 λ_{mm} は

$$\exp\left[-i\left(\Delta E_m - \frac{i\gamma}{2}\right)T\right] = \exp[-i(\Delta E_m)T]\exp\left(-\frac{\gamma T}{2}\right)$$

に比例することがわかる．最初の因子はエネルギー変化である．第二の因子は容易に解釈される．時間 T の後に状態 m にある確率は $|\lambda_{mm}|^2 = \exp(-\gamma T)$ であるからである．これは時間とともに減少する．なぜならそれぞれの時刻で m から他の状態への遷移が起こる確率が存在するからである．すなわち，もしすべてに矛盾がなければ，γ は m から連続スペクトル中の同じエネルギーの他の状態に毎秒遷移する全確率でなければならない．これは正しい．なぜなら（6-118）から γ は

$$\gamma = \sum_k 2\pi\delta(E_m - E_k)|V_{mk}|^2 \tag{6-120}$$

したがって，毎秒当たりの全確率の変化は，すべての終状態について（6-87）の和をとったものである（到達し得る終状態は，摂動 V と摂動の次数に依存する）．

γ の逆数は状態の平均寿命と呼ばれる．厳密にいうと，有限の寿命をもつ状態は確定したエネルギーをもたない．Heisenberg の関係によるエネルギーの不確定性は，($\hbar$/寿命)，すなわち γ である．

それぞれ崩壊速度 γ をもつ2つの準位のエネルギー差を求めるために共鳴の実験を行うと，共鳴は鋭くなく特定の幅をもっている．共鳴の中心はエネルギー差を与え，共鳴の幅はそれぞれの準位の γ の和を与える．

第7章　遷移要素

前章で量子力学的系の状態変化に対する摂動の方法の考え方を述べた．非摂動ハミルトニアンが時間によらない系に，この方法を適用して調べた．この章では摂動の概念をさらに発展させ，非摂動状態が時間的に変動するハミルトニアンをもつ系にも適用できるように摂動の方法を一般化する．もっと一般的な表記法を導入し，量子力学系で起こる状態変化の様子をより広く深く理解することを試みる．導入される表記法は，この章の初めの部分で定義されるあるタイプの関数に適用される．この関数は**遷移要素**と呼ばれる．

この章は4つの部分からなる．第1部分は7-1節であり，第6章の摂動論を基礎とした例題を用いて遷移振幅と遷移要素の定義を与える．第2部分は7-2節—7-4節からなり，遷移要素の間の興味ある一般的関係を与えている．第3部分は7-5節からなり，経路積分で定義される遷移要素と量子力学の通常の演算子の記法によって定義される量子力学的遷移との間の関係を示している．最後の部分は7-6節と7-7節からなり，そこで前節で述べた結果を量子力学の2つの興味ある問題に適用している．

7-1　遷移要素の定義

量子力学系の時間発展は次のように描かれる．初期時刻 t_1 において状態は波動関数 $\psi(x_1, t_1)$ で記述される．後の時刻 t_2 でこのもとの状態は発展して状態 $\phi(x_2, t_2)$ となる．

この後の時刻において次のような問いを発してみよう．系が特定の状態 $\chi(x_2, t_2)$ にある確率はいくらか．第5章で述べた一般原理から，この特定の状態に系を見出す確率が

$$\int dx_2\, \chi^*(x_2, t_2)\phi(x_2, t_2)$$

で定義される振幅の2乗であることがわかる．

第3章から次のこともわかっている．時刻 t_1 と t_2 の間の系の伝播を記述する核

K を用いて関数 ϕ をもとの波動関数で表すことができる．したがって，特定の状態に系を見出す確率を決める際に，もとの波動関数 ψ から出発して時間の隔たりを伝播核 $K(2,1)$ でつなげることができる．

その結果得られる振幅は**遷移振幅**と呼ばれ，その絶対値の 2 乗は求める確率を与える．この振幅を次のように表す．

$$\langle\chi|1|\psi\rangle=\int dx_2\int dx_1\ \chi^*(x_2)K(2,1)\psi(x_1) \tag{7-1}$$

遷移現象のもっと基礎的な記述に戻るために，2 つの時間の間における系の振る舞いを記述する作用 S を再度導入し，遷移振幅を次のように表す．

$$\langle\chi|1|\psi\rangle_S=\int dx_2\int dx_1\int_{x_1}^{x_2}\mathscr{D}x(t)\ \chi^*(x_2)e^{iS/\hbar}\psi(x_1) \tag{7-2}$$

ここで記号をいくぶん具体的に表した．すなわち，遷移振幅に記号 S を付し，作用積分が計算されていることを表した．経路積分は x_1 から x_2 に到るすべての経路についてとる．この経路積分の結果の式に 2 つの波動関数を掛け 2 つの時刻における空間変数について積分する．

さらに先に進む前に，もっと一般の状況にも適用できるように記号をより完全に定義する．当面物理的内容を記述せずに汎関数 $F[x(t)]$ を導入する．この汎関数を用いて遷移要素を次のように定義する．

$$\langle\chi|F|\psi\rangle_S=\int dx_2\int dx_1\int\mathscr{D}x(t)\ \chi^*(x_2)F[x(t)]e^{iS/\hbar}\psi(x_1) \tag{7-3}$$

ここで F は $x(t)$ の任意の汎関数であるが，端点における $x(t)$ の値 x_1，x_2 および端点の外側の $x(t)$ の値にはよらない．$F=1$ という特別の場合，(7-3) の積分は遷移振幅を定義する．

遷移振幅を直観的物理のレベルで理解することは困難である．理解に到る方法の 1 つは古典力学との類似を調べることである．ブラウン運動で動く小さい粒子を思い浮べよう．ある初期時刻 $t=t_1$ において粒子は x_1 にいる．時刻 t_2 において点 x_2 に粒子が到達する確率を求めたい．量子力学的粒子については，初期状態から出発してある終状態に到るものを考える．したがって，ブラウン粒子に対する点 x_1 は初期の波動関数 $\psi(x_1)$ と類似しており，点 x_2 は $\chi(x_2)$ と類似している．さらに量子力学の問題を解くためには初期状態と終状態の変数 x_1 と x_2 についての積分が必要である．これは古典力学の問題では不必要な操作である．

粒子の運動に対するすべての可能な経路を考えることにより，古典論の問題を解

くものとしよう．それぞれの経路に重みを与える．この重みは粒子が実際にそのような経路を通る確率を定義する．そしてすべての経路について重みをつけて積分する．重み関数は（7-2）の積分に現れる項 $e^{iS/\hbar}$ に類似している．

このような問題において，最終の位置は1つの点でなくむしろ小さな領域 (x_2, x_2+dx) である．結果を適当に規格化すると分布関数 $P(x_2)$ が得られ，x_2 の（微小）近傍に到達する相対確率を与える．ϕ と χ が δ 関数であるとき，この関数は（7-2）の遷移振幅と類似している．

さて，x_2 に到達する相対確率だけでなく，運動について知りたいものとする．たとえば，ある特定の時刻［たとえば，出発したのち1秒後］において粒子がもつ加速度を求めるものとする．しかしその場合加速度に対する加重平均が必要となる．それぞれの可能な経路の加速度に，経路の確率を定義する関数の重みを掛けることが必要となる．このような加重平均は (7-3) の遷移要素と類似している．時刻 t における加速度など，求める物理量を (7-3) の積分の中の関数 $F[x(t)]$ に代入する．古典論の問題は，（7-3）の経路積分と形式的に非常に似た経路積分によって解ける．

この章の残りの部分でこの類似性を用いる．そしてときどき遷移確率を「加重平均」と呼ぶ．しかしながら，量子力学における重み関数は複素数であることに注意すべきである．よってその結果は通常の意味における「平均」ではない．

この古典論の類似性で述べた，ブラウン運動の問題を経路積分で解く方法は，実際に非常に有効な方法である．このことは第12章に詳しく述べてある．ここでは第6章で述べた摂動論を用いて遷移要素の概念を明らかにする．

摂動　系の発展を記述する作用は2つの部分に分離される．すなわち，$S=S_0+\sigma$．初めの部分 S_0 は単純な経路積分を与えるものとする．もう1つの部分 σ は十分小さく摂動の枠組みが適用できるものとする．（7-2）の指数関数を次のように表す．

$$e^{iS/\hbar}=e^{iS_0/\hbar}e^{i\sigma/\hbar} \tag{7-4}$$

（7-3）を用いると，（7-2）の遷移要素は

$$\langle\chi|1|\psi\rangle_{S_0+\sigma}=\langle\chi|e^{i\sigma/\hbar}|\psi\rangle_{S_0} \tag{7-5}$$

となる．指数関数を展開すると

$$\langle\chi|1|\psi\rangle_{S_0+\sigma}=\langle\chi|1|\psi\rangle_{S_0}+\frac{i}{\hbar}\langle\chi|\sigma|\psi\rangle_{S_0}-\frac{1}{2\hbar^2}\langle\chi|\sigma^2|\psi\rangle_{S_0}+\cdots \tag{7-6}$$

が得られる．

この展開は (6-3) の一般化であり摂動論の基礎をなす．量子力学のほとんどの問題に現れる遷移要素はこの展開によって導かれる．

摂動作用 σ が摂動ポテンシャルによるものとする．

$$\sigma = -\int dt \; V[x(t), t] \tag{7-7}$$

このとき 1 次の摂動は次の遷移要素で与えられる．

$$\langle\chi|\sigma|\psi\rangle_{S_0} = -\int dt \; \langle\chi|\, V[x(t), t]|\psi\rangle_{S_0} \tag{7-8}$$

この要素を評価するには積分

$$\langle\chi|\, V[x(t), t]|\psi\rangle_{S_0} = \int dx_2 \int dx_1 \int_{x_1}^{x_2} \mathscr{D}x(t)\chi^*(x_2)e^{iS_0/\hbar}\, V[x(t), t]\,\psi(x_1) \tag{7-9}$$

を求めなければならない．

この積分を解く第一段階は，(6-8)—(6-11) に表されている摂動核 $K^{(1)}$ を解くことと似ている．経路積分に対するこの解は，両端点 x_1, x_2 についての積分と中間点 x_3 [(6-10) の点 c に相当する] についての積分を行う結果得られる．すなわち，

$$\langle\chi|\, V[x(t), t]|\psi\rangle_{S_0} = \int dx_2 \int dx_3 \int dx_1 \;\chi^*(x_2)K_0(2, 3)\, V(3)K_0(3, 1)\psi(x_1) \tag{7-10}$$

ここで前に導入した 3 つの概念を結び付ける式に到達したのである．まず，(3-42) で定義された波動関数に対する伝播則を用いた．次に，(5-31) で定義された振幅関数を用いた．これは，ある状態に存在することが知られている系が他の状態に移る振幅を与える．最後に時間的な伝播を記述する核に対して，(6-11) で与えられる 1 次摂動論を用いた．これらの概念を組み合わせると (7-10) の遷移要素が得られる．この要素の絶対値の 2 乗は状態 ψ から出発した系が弱いポテンシャル $V(x, t)$ の作用を受けて後の時刻に状態 χ に見出される確率を与える．[ただし，状態 χ は $V=0$ の場合に到達できないものとする．すなわち，$\langle\chi|1|\psi\rangle=0$]

(6-23) の記号を短縮化して (6-25) の形にしたように，(3-42) を用いて (7-10) の記号を短縮できる．関数 $\psi(x_3, t_3)$ を次のように定義する．

$$\psi(3) = \int dx_1 \; K_0(3, 1)\psi(x_1) \tag{7-11}$$

これは摂動の作用がないときに初期波動関数が時間発展した結果の時刻 t_3 における波動関数である．同様に次のようにして χ を定義する．

$$\chi^*(x_3, t_3) = \int dx_2\ \chi^*(x_2) K_0(2, 3) \tag{7-12}$$

$\chi^*(x_3, t_3)$ の複素共役 $\chi(x_3, t_3)$ は波動関数で，摂動がないとき時刻 t_2 において関数 $\chi(x_2)$ となる．［(4-38) とそれ以下の議論および問題4-7を見よ．］

これらの新しい波動関数を使うと摂動展開の 1 次の項は単純化でき，次のようになる．

$$\langle\chi|\int dt\ V[x(t), t)]|\psi\rangle_{S_0} = \int dx_3 \int dt_3\ \chi^*(3) V(3) \psi(3) \tag{7-13}$$

この形に書かれた遷移振幅は6-5節で導入された遷移振幅 λ_{mn} を一般化したものであることがわかる．(7-13) の右辺の波動関数が固有関数の場合，遷移振幅は (6-70) で定義された $\lambda_{mn}^{(1)}$ と同じになる．

したがって，特定の時刻の x だけに依存する［すなわち，$x(t)$ に依存する通常の関数］汎関数 $F[x(t)]$ の遷移要素やその汎関数の時間積分を求めることにはなにも問題がない．2 つの離れた時刻における x の値を含む汎関数の遷移要素を求めることも簡単である．これはたとえば 2 次摂動項に現れ，次のように表される．

$$\frac{1}{2\hbar^2}\langle\chi|\sigma^2|\psi\rangle_{S_0} = \frac{1}{2\hbar^2}\int dt \int ds\ \langle\chi|\, V[x(t), t]\, V[x(s), s]|\psi\rangle \tag{7-14}$$

この式の被積分関数そのものが遷移要素であり，次のように表される．

$$\langle\chi|\, V[x(t), t]\, V[x(s), s]|\psi\rangle = \int dx_4 \int dx_3\ \chi^*(4) V(4) K_0(4, 3) V(3) \psi(3) \tag{7-15}$$

ここで $s<t$ のとき $t_3=s$，$t_4=t$ とおき，$s>t$ のとき $t_3=t$，$t_4=s$ とおいた．

したがって摂動展開の 2 次の項は次のようになる．

$$\frac{1}{2\hbar^2}\langle\chi|\int dt V[x(t), t] \int ds V[x(s), s]|\psi\rangle$$
$$= \int dx_4 \int dx_3 \int dt_4 \int dt_3\ \chi^*(4) V(4) K_0(4, 3) V(3) \psi(3) \tag{7-16}$$

これは (6-74) で定義された遷移振幅の一般化とみなすことができる．3 つ以上の関数を含む表式もまた容易に書くことができる．

(7-4) はまたもっと一般の摂動論に対応する．たとえば，振動子と相互作用している粒子の場合を考えよう．振動子を記述する座標についての積分をしたあと，得られる作用は $S_0 + \sigma$ と表される (3-10節を参照)．ここで

$$\sigma = \frac{1}{m\omega \sin(\omega T)} \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{t_1}^{t} ds\ g[x(t), t] g[x(s), s] \sin\omega(t_2 - t) \sin\omega(s - t_1) \tag{7-17}$$

である．$g[x(t), t]$ は粒子と振動子の相互作用を特徴づける．また $T=t_2-t_1$ である．

このような複雑な作用を含む経路積分を評価するのは非常に困難であることを見てきた．しかし複雑な項 σ の効果が小さいことが期待されるときは，(7-4) の摂動展開を使って少ない労力で有用な結果を求めることができる．具体的には，このような展開の1次の項が得られる(すなわち第1 Born近似)．σ に対する表式 (7-17) を使って，$(i/\hbar)\langle\chi|\sigma|\psi\rangle_{s_0}$ という項を評価しなければならない．この項は次のように表される．

$$\frac{i}{\hbar}\langle\chi|\sigma|\psi\rangle_{s_0}=\frac{i}{\hbar m\omega\sin(\omega T)}\int_{t_1}^{t_2}dt\int_{t_1}^{t}ds\ \langle\chi|g[x(t), t]g[x(s), s]|\psi\rangle_{s_0}$$
$$\times\sin\omega(t_2-t)\sin\omega(s-t_1) \tag{7-18}$$

よって問題の困難な部分は

$$\langle\chi|g[x(t), t]g[x(s), s]|\psi\rangle_{s_0}$$

を求めることである．

しかしこれはすでに (7-15) で求められている．V を g で置き換えさえすればよい．したがって次のように書く．

$$\langle\chi|g[x(t), t]g[x(s), s]|\psi\rangle_{s_0}$$
$$=\int dx_4\int dx_3\ \chi^*(4)g[x(t_4), t_4]K_0(4, 3)g[x(t_3), t_3]\psi(3) \tag{7-19}$$

この式を (7-18) に代入すると第1 Born 近似 $(i/\hbar)\langle\chi|\sigma|\psi\rangle_{s_0}$ に対する最終結果が得られる．

後の各章で遷移要素はもっと頻繁に現れる．それぞれの例題で遷移要素はここで示したように直接的に評価される．この理由から，この章の残りの部分は，以下の各章で取り扱う問題にとってあまり本質的ではない．しかしながら本書にこの部分を取り入れた理由は2つある．まず，遷移要素間の非常に一般的な関係を求めることができる．この関係は量子力学を定義するときの別の出発点となりうるのである．次に，量子力学の普通の演算子記法に慣れている人達にとって，通常の表示を本書で用いられている表示［たとえば，(7-3) の形の式など］に翻訳する例題があると便利である．

翻訳の規則が得られているので，経路積分法から導く形で展開されている後章の主題は，よく知られた演算子の概念で解釈可能となるのである．

この章の残りの部分で議論する関係式は，系の初期状態や終状態を記述する波動関数の形に依存せず，遷移要素の積分を定義する際に用いられる．この理由により，波動関数に特に言及することを省略して記法を簡略化する．すなわち，遷移要素は $\langle\chi|F|\psi\rangle_S$ と書く代わりに $\langle F\rangle_S$ と書く．

7-2　汎関数微分

これから遷移要素の間の興味ある関係を導出する数学方法を述べる．この関係は汎関数微分という数学的概念を使うともっともエレガントに表現される．この概念はあまり馴染みのないものかも知れないので，これを本節で述べる．

汎関数 $F[x(t)]$ とは，われわれが選ぶ関数 $x(t)$ のそれぞれに対して1つの数を与えるものである．次の疑問が生じる．関数 $x(t)$ を少しだけ変化させるとき，どれだけこの数が変化するか．すなわち，小さい $\eta(t)$ に対して $F[x(t)+\eta(t)]-F[x(t)]$ はどれくらいの大きさになるか．η の1次の効果は（その存在等を仮定すると）η の線形表式 $\int K(s)\,\eta(s)\,ds$ となる．このとき $K(s)$ は s における関数 $x(t)$ の変分に関する F の汎関数微分と呼ばれる．これを $\delta F/\delta x(s)$ と書く．すなわち，1次まででは

$$F[x+\eta]=F[x]+\int\frac{\delta F}{\delta x(s)}\eta(s)ds+\cdots \tag{7-20}$$

となる．この $\delta F/\delta x(s)$ が関数 $x(t)$ に依存することはもちろんであるが，s にも依存する．すなわち，これは $x(t)$ の汎関数であり時刻 s の関数である．

これを別の見方で見ることもできる．時間を多くの小さい区間 ε に分割し，各時刻の値を $t_i(t_{i+1}=\varepsilon+t_i)$ とする．関数 $x(t)$ は時刻 t_i における値 x_i を与えることにより近似的に特定できる．汎関数 $F[x(t)]$ はすべての x_i に依存する数ということになる．すなわち，多変数 x_i の通常の関数となる．

$$F[x(t)]\rightarrow F(\cdots,x_i,x_{i+1},\cdots) \tag{7-21}$$

ここでこれらの変数の1つ x_i に関する導関数 $\partial F/\partial x_i$ を考える．汎関数微分というのはちょうどこの偏導関数を ε で割り $t_i=s$ における値をとったものである．すなわち，

$$\frac{\delta F}{\delta x(s)}\rightarrow\frac{1}{\varepsilon}\frac{\partial F}{\partial x_i} \tag{7-22}$$

このことは次のようにして理解できる．経路を $x(t)$ から $x(t)+\eta(t)$ に変えるということはすべての x_i を $x_i+\eta_i[\eta_i=\eta(t_i)]$ に変えることである．したがってこの関

数の１次の変化は通常の偏微分の規則から

$$F(\cdots, x_i+\eta_i, x_{i+1}+\eta_{i+1}, \cdots)-F(\cdots, x_i, x_{i+1}, \cdots)=\sum_i \frac{\partial F}{\partial x_i}\eta_i \qquad (7\text{-}23)$$

となる．$(1/\varepsilon)(\partial F/\partial x_i)=K_i$ と書くことにすると，右辺の和は $\sum_i K_i\eta_i\varepsilon$ となり，$\varepsilon\to 0$ の極限で $\int K(t)\eta(t)dt$ となる．よってこの極限が $\varepsilon\to 0$ で存在するならば，$\delta F/\delta x(s)$ と等しい．

微分の概念も使うことができる．多変数関数に対して

$$df=\sum_i \frac{\partial F}{\partial x_i}dx_i$$

と書くように，任意の汎関数の第１変分について

$$\delta F=\int \frac{\delta F}{\delta x(s)}\delta x(s)ds \qquad (7\text{-}24)$$

と書くことができる．ここで $\delta x(t)$ は $x(t)$ における経路の微分変化である．

問題 7 - 1　$S=\int_{t_1}^{t_2} L(\dot{x}, x, t)dt$ のとき，区間（t_1, t_2）の任意の s に対して，

$$\frac{\delta S}{\delta x(s)}=-\frac{d}{ds}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)+\frac{\partial L}{\partial x} \qquad (7\text{-}25)$$

であることを示せ．ここで偏導関数は $t=s$ において評価される．

問題 7 - 2　$F[x]=x(\tau)$ ならば，

$$\frac{\delta F}{\delta x(s)}=\delta(\tau-s) \qquad (7\text{-}26)$$

であることを示せ．

問題 7 - 3

$$F=\exp\left[\frac{1}{2}\int d^3\mathbf{r}_1\int d^3\mathbf{r}_2 \int dt_1\int dt_2\, j(\mathbf{r}_1, t_1)j(\mathbf{r}_2, t_2)R(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2, t_1-t_2)\right]$$

のとき，

$$\frac{\delta F}{\delta j(\mathbf{r}, s)}=\left[\int d\mathbf{r}'\int dt' R(\mathbf{r}-\mathbf{r}', s-t')\right]F \qquad (7\text{-}27)$$

であることを示せ．関数 $j(\mathbf{r}, t)$ が４変数（x, y, z, t）の関数であることに注意．汎導関数を評価する点を指定する際に，たとえば，(7-14)で用いられた１変数 s は座標の組（x, y, z, t）で置き換えられる．

前節の冒頭で述べた汎関数間の一般的関係は $\delta F/\delta x(s)$ の遷移要素に対する公式を展開することによって得られる．これはもっとも容易な方法である．次の量を考える．

$$\langle F\rangle_S=\int\mathcal{D}x(t)\,F[x(t)]e^{(i/\hbar)S[x(t)]} \tag{7-28}$$

経路についての積分において，変数 $x(t)$ を $x(t)+\eta(t)$ で置き換えよう．$\eta(t)$ を固定すると，$\mathcal{D}[x(t)+\eta(t)]=\mathcal{D}x(t)$ ［なぜなら，$d(x_i+\eta_i)=dx_i$］となるが，この変数の置き換えによって積分は変わらない．よって

$$\begin{aligned}\langle F\rangle_S&=\int\mathcal{D}x(t)\,F[x(t)+\eta(t)]e^{(i/\hbar)S[x(t)+\eta(t)]}\\&=\int\mathcal{D}x(t)\,F[x(t)]e^{(i/\hbar)S[x(t)]}+\int\mathcal{D}x(t)\left[\int ds\frac{\delta F}{\delta x(s)}\eta(s)\right]e^{(i/\hbar)S[x(t)]}\\&\quad+\frac{i}{\hbar}\int\mathcal{D}x(t)\,F[x(t)]\left[\int ds\frac{\delta S}{\delta x(s)}\eta(s)\right]e^{(i/\hbar)S[x(t)]}+\cdots\end{aligned} \tag{7-29}$$

ここで指数関数を展開し 1 次までを示した．0 次の項は厳密に $\langle F\rangle_S$ であるから，残りの項は 0 でなければならない．特に，任意の $\eta(s)$ に対して 1 次の項は 0 とならなければならないから，次の関係式が成り立つのである．

$$\left\langle\frac{\delta F}{\delta x(s)}\right\rangle_S=-\frac{i}{\hbar}\left\langle F\frac{\delta S}{\delta x(s)}\right\rangle_S \tag{7-30}$$

この一般的関係式は多くの重要な帰結をもつ．

量子力学の法則を定義するための出発点として（7-30）を用いることが可能かも知れない．これから遡ってたとえば（7-6）を再現することができるかも知れない．量子力学のある一般化が望ましいのであるならば，$e^{iS/\hbar}$ という項に現れる作用 S の中に一般化を含めることを考えてもよいであろうし，または，(7-30)のような形式から出発して微分の表記を用いて修正を導入することもできよう．Julian Schwinger は（7-30）で示唆される量子力学の定式化を研究した．

時間を区間 ε に分割されたものとみなし，また汎関数を t_i に対応する x_i の関数とみなすことにより，(7-30)の関係がどのような結果をもたらすかを見ることができる．次の経路積分を考えよう．

$$\int\mathcal{D}x(t)\,\frac{\partial F}{\partial x_k}e^{(i/\hbar)S[x(t)]} \tag{7-31}$$

ここで t_k は端点ではない中間の時刻である．経路積分は単にすべての点 x_i についての積分となる．したがって部分積分を行うと

$$\int \mathcal{D}x(t)\,\frac{\partial F}{\partial x_k}e^{(i/\hbar)S[x(t)]} = -\frac{i}{\hbar}\int \mathcal{D}x(t)\,F\frac{\partial S}{\partial x_k}e^{(i/\hbar)S[x(t)]} \tag{7-32}$$

が得られる．ここで積分の部分を落とした．

問題 7-4　積分の部分が0となる理由を議論せよ．

結果は

$$\left\langle \frac{\partial F}{\partial x_k}\right\rangle_S = -\frac{i}{\hbar}\left\langle F\frac{\partial S}{\partial x_k}\right\rangle_S \tag{7-33}$$

である．これは（7-30）と同じ内容を表す．

この関係式を微分で表すほうがよい．

$$\langle \delta F\rangle_S = -\frac{i}{\hbar}\langle F\delta S\rangle_S \tag{7-34}$$

なぜなら，こうすると F と S が依存している特定の変数を表示する必要がないからである．

問題 7-5　(7-33) は直角座標にのみ適用できるのであるから，(7-34) は誤解を招きやすいことを論ぜよ． 議論の際に，たとえば球座標を用いて $\langle \partial F/\partial r_k\rangle_S$ を求めたい場合，どのような関係式が対応するかを調べよ．

7-3　特殊な汎関数の遷移要素

(7-34)の関係式は多くの興味ある意味をもっている．この節ではそれらのうちのいくつかを調べる．ポテンシャル $V[x(t)]$ の中を運動する1次元粒子の特別な場合を考える．

粒子の経路についての作用が次式で与えられるものとする．

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt\,\left\{\frac{m\dot{x}^2}{2} - V[x(t)]\right\} \tag{7-35}$$

それぞれの経路に微小な変分 $\delta x(t)$ を行い1次までとると，

$$\delta S = -\int_{t_1}^{t_2} dt\;[m\ddot{x} + V'(x)]\delta x(t) \tag{7-36}$$

となる．(7-34) を用いると

$$\langle \delta F\rangle_S = -\frac{i}{\hbar}\left\langle F\int_{t_1}^{t_2} dt[m\ddot{x} + V'(x)]\delta x(t)\right\rangle \tag{7-37}$$

が得られる．一方，(7-33)を導出するときに用いた観点に立ちかえって考えてみよ

う．すなわち，時間を長さ ε の微小な切片に分けると作用は次のように表される．

$$S=\sum_{i=1}^{N-1}\left[m\frac{(x_{i+1}-x_i)^2}{2\varepsilon}-V(x_i)\varepsilon\right] \tag{7-38}$$

ある特定の時刻 t_k を選び，前と同様にそのときの経路の位置を x_k とすると，

$$\frac{\partial S}{\partial x_k}=m\left(\frac{x_{k+1}-x_k}{\varepsilon}-\frac{x_k-x_{k-1}}{\varepsilon}\right)+V'(x_k)\varepsilon \tag{7-39}$$

となる．(7-33) を適用すると，

$$\left\langle\frac{\partial F}{\partial x_k}\right\rangle_S=-\frac{i\varepsilon}{\hbar}\left\langle F\left[m\left(\frac{x_{k+1}-2x_k+x_{k-1}}{\varepsilon^2}\right)+V'(x_k)\right]\right\rangle \tag{7-40}$$

が得られる．

この最後の式で，分母に ε^2 をもつ因子は実際時刻 t_k における加速度である．したがって (7-40) は (7-37) の特別な例である．特に，すべての $t\neq t_k$ に対して $\delta x(t)=0$ のとき (7-37) は (7-40) となる．$\delta x(t)$ が $\varepsilon\cdot\delta x_k\cdot\delta(t-t_k)$ という値をとるとき，(7-40) が得られる．実際 (7-40) はすべての k について正しいのであるから，記号を詳細に較べると，(7-37) と完全に等価である．

(7-37) において特別な関数 $F=1$ をとると，$\delta F=0$ であるから

$$-\frac{i}{\hbar}\left\langle\int dt[m\ddot{x}+V'(x)]\delta x(t)\right\rangle=0 \tag{7-41}$$

が得られる．この結果は $\delta x(t)$ を任意に選んでも成り立つので

$$\langle m\ddot{x}\rangle=-\langle V'(x)\rangle \tag{7-42}$$

がすべての時刻で成り立たなければならない．これは Newton の法則の量子力学的表現である．遷移要素の古典的表現を7-1節で述べたが，これを使うと次のように述べることができる．任意の時刻における加速度と質量の積をあらゆる経路について $e^{iS/\hbar}$ の重みで「平均」したものは，その時刻における力（ポテンシャルの勾配の符号を変えたもの）を加重「平均」したものと等しい．

もう 1 つの例として，F が x_k 以外のすべての位置変数の任意の汎関数であって 0 でないものとする．このとき (7-40) の左辺は 0 である ($\partial F/\partial x_k=0$) から，

$$\left\langle F(x_1,x_2,\cdots,x_{k-1},x_{k+1},\cdots,x_N)\left[m\frac{x_{k+1}-2x_k+x_{k-1}}{\varepsilon^2}+V'(x_k)\right]\right\rangle=0 \tag{7-43}$$

この方程式の意味は次のようなことである．$m\ddot{x}+V'(x)$ をすべての経路について平均すると t_k において 0 となるということである．その際，経路に任意の汎関数の重みをつけてよいが，その汎関数が時刻 t_k における経路の位置によらなければよい．

しかしながら，汎関数がその時刻における経路の位置に依存するものとしよう．

特に単純に汎関数を x_k とする．(7-40) を適用すると

$$\langle 1\rangle=\frac{i\varepsilon}{\hbar}\left\langle mx_k\frac{x_{k+1}-2x_k-x_{k-1}}{\varepsilon^2}+x_kV'(x_k)\right\rangle$$

$$=\frac{i}{\hbar}\left\langle mx_k\left(\frac{x_{k+1}-x_k}{\varepsilon}-\frac{x_k-x_{k-1}}{\varepsilon}\right)+\varepsilon x_kV'(x_k)\right\rangle \tag{7-44}$$

となる．ポテンシャル V が滑らかな関数であるとすると，$\varepsilon\to 0$ の極限で $\varepsilon x_kV'(x_k)$ は他の項と較べて無視できるほど小さくなる．その結果

$$\left\langle m\frac{x_{k+1}-x_k}{\varepsilon}x_k\right\rangle-\left\langle x_km\frac{x_k-x_{k-1}}{\varepsilon}\right\rangle=\frac{\hbar}{i}\langle 1\rangle \tag{7-45}$$

が得られる．

この最後の式には位置変数 x と運動量変数 $m\dot{x}$ の積が現れる．第 1 項では運動量はまず時刻 $t_k+\varepsilon/2$ に対応する線形平均として評価されている．位置は t_k におけるものである．第 2 項においては位置は t_k におけるものであるが，運動量は時刻 $t_k-\varepsilon/2$ に対応する．したがってこの式の意味は次のようになる．位置と運動量の積の遷移要素はそれらの量の時間的順序に依存する．

後にこのことを通常の演算子の表現を使って表すときに，(7-42)に対応する演算子運動方程式と演算子交換法則 (7-45) とがともに同じ基礎方程式 (7-34) から導かれることを示す．

(7-45)から導かれるもう 1 つの結果を用いると，量子力学において重要な経路の特性についてよい理解が得られる．次の 2 つの項を考えよう．

$$\left\langle x_km\frac{x_k-x_{k-1}}{\varepsilon}\right\rangle \tag{7-46}$$

$$\left\langle x_{k+1}m\frac{x_{k+1}-x_k}{\varepsilon}\right\rangle \tag{7-47}$$

これら 2 つの項の差は ε の程度である．なぜなら，それらは同じ量であり ε の区間だけ異なる時刻で計算されたものであるからである．このようにして(7-45)の第 2 項に (7-47) を代入することが正当化されるのである．結果は

$$\left\langle m\frac{x_{k+1}-x_k}{\varepsilon}(x_k-x_{k+1})\right\rangle=\frac{\hbar}{i}\langle 1\rangle \tag{7-48}$$

となる．他方これを次のように書くこともできる．

$$\left\langle\left(\frac{x_{k+1}-x_k}{\varepsilon}\right)^2\right\rangle=-\frac{\hbar}{im\varepsilon}\langle 1\rangle \tag{7-49}$$

この式から速度の 2 乗の遷移要素が $1/\varepsilon$ の程度であり，ε が 0 に近づくと無限大

に発散することがわかる．この結果から，量子力学的粒子について重要な経路はあらゆるところで確定した勾配（速度）をもつ経路ではなく，むしろ図7-1の略図に示したように非常に細かいスケールで極めて不規則な経路であるということがわかる．実際このような不規則性は「平均」2乗速度が存在しないようなものである．「平均」というときは古典論の意味においての平均を指す．

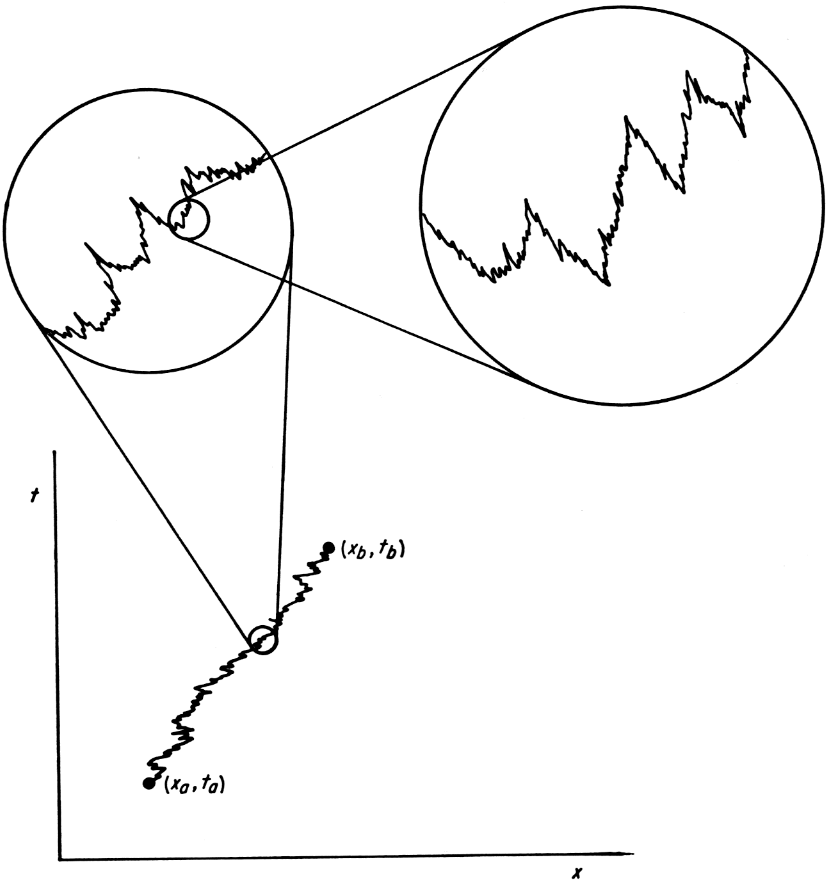


図7-1　量子力学的粒子の典型的な経路は図に示すように細かいスケールで非常に不規則である．よって，平均速度は定義できても，速度の二乗平均はどの点でも存在しない．すなわち，経路は微分可能でない．

ある平均速度が $[x(t+\Delta t)-x(t)]/\Delta t$ のような形で短い時間間隔 Δt に対して定義されていると，この2乗の「平均」は $-\hbar/(im\Delta t)$ となる．すなわち，短い時間間隔について速度の2乗を平均したものは有限であるが，その値は時間区間が短くなると大きくなる．

量子力学的経路は非常に不規則になるように見える．しかしながら，時間の長さを十分とると，この不規則性は平均されてなくなり，古典的な移動（ドリフト，「平均」速度）を生ずる．速度の「平均」値は短い時間区間に対しては非常に大きくなる．

問題 7-6　3次元空間を運動する粒子に対して以下を示せ．

$$\langle(x_{k+1}-x_k)^2\rangle=\langle(y_{k+1}-y_k)^2\rangle=\langle(z_{k+1}-z_k)^2\rangle=-\frac{\hbar\varepsilon}{im} \tag{7-50}$$

$$\begin{aligned}\langle(x_{k+1}-x_k)(y_{k+1}-y_k)\rangle&=\langle(x_{k+1}-x_k)(z_{k+1}-z_k)\rangle\\&=\langle(y_{k+1}-y_k)(z_{k+1}-z_k)\rangle=0\end{aligned} \tag{7-51}$$

運動エネルギーの遷移要素を単に

$$\frac{1}{2}\left\langle m\left(\frac{x_{k+1}-x_k}{\varepsilon}\right)^2\right\rangle \tag{7-52}$$

と書くのはよくない．なぜなら，この量は ε が0に近づくとき無限大となる．運動エネルギーを表す適当な式をどのようにして見つけるか．ある種の物理的摂動問題において現れる汎関数 F のみが重要であるという発見的予想を立てることもできよう．どのようにして運動エネルギーを摂動によって求めることができるか．粒子の質量が短い時間間隔 Δt の間に $1+\eta$（η は微小）だけ摂動を受けるとすると，作用は $\eta\Delta t(m/2)\dot{x}^2$ だけ摂動を受ける．これが運動エネルギーに対応する．次の疑問が生じる．m が短時間に $m(1+\eta)$ だけ変化したときに $\langle\sigma\rangle_{S_0}$ の1次摂動の形はどのようなものか．

簡単化のためにこの短い時間を ε とする．これは時間のステップを定義するときに用いたものである．そうすると1次の項を $\varepsilon\eta$ で割ったものが運動エネルギーである．(7-38) の S の摂動（つまり $i=k$ の項において m が $m+\eta m$ だけ変化した場合）は明らかに $\varepsilon\eta(m/2)(x_{k+1}-x_k)^2/\varepsilon^2$ である．しかしこれは m が変化したときの経路積分の変化のすべてではない．それぞれの m に対して規格化因子 A は $m^{+1/2}$

のように変化するから，これから因子 $(1+1/2\eta)$ が導かれる．したがって m が変化したとき経路積分の1次の変化は，$\eta\varepsilon$ で割ると

$$\frac{i}{\hbar}\left\langle \frac{m}{2}\frac{(x_{k+1}-x_k)^2}{\varepsilon^2}+\frac{\hbar}{2i\varepsilon}\right\rangle \tag{7-53}$$

のようになる．これは運動エネルギーに $i/\hbar$ を掛けたものでなければならない．

(7-49) を用いると，(7-53) が0となることが期待されるが，(7-49) は $\varepsilon\to 0$ のとき $1/\varepsilon$ のオーダーでのみ正しい．(7-53) は実際 $\varepsilon\to 0$ で有限である．この表式は2次の項を展開することにより書き改められる．(7-40) において F を $x_{k+1}-x_k$ とする．ε の最低次の項を残すと

$$\left\langle \frac{m}{2}\left(\frac{x_{k+1}-x_k}{\varepsilon}\right)\left(\frac{x_k-x_{k-1}}{\varepsilon}\right)\right\rangle=\left\langle \frac{m}{2}\left(\frac{x_{k+1}-x_k}{\varepsilon}\right)^2\right\rangle+\frac{\hbar}{2i\varepsilon}\langle 1\rangle \tag{7-54}$$

となる．したがって (7-54) の左辺を運動エネルギーの遷移要素として定義することができる．

この結果から明らかなように，速度のべきに関する遷移要素の満足な式を定義するためのもっとも簡単な方法は，少しだけ異なる時刻における速度をかけあわせることによってべきを定義することである．

簡単な問題では遷移要素を直接的に求めることができる場合がある．そのような問題では，7-2節で導いた遷移要素間の関係式を用いて，同じ結果を得ることができる．それらの関係式から遷移要素についての微分方程式が得られ，解くことができる．例をいくつか示すが，この方法が有効であるという例は簡単なものに限られ，したがって直接的に計算すること自体もそれほど困難ではないものである．

第一の例として，全時間区間 T の間に x_1 から x_2 に到る自由粒子の場合を考えよう．時刻 t における位置 $x(t)$ の遷移要素を求めてみよう．もちろん，これは t のある関数であり，明らかに次のことが成り立つ．

$$\langle x(0)\rangle=x_1\langle 1\rangle \qquad \langle x(T)\rangle=x_2\langle 1\rangle \tag{7-55}$$

粒子に作用するポテンシャルが空間的に一定である（すなわち，力が何も作用しない）場合，(7-42) により位置の遷移要素の2次導関数は0となる．したがって積分により

$$\langle x(t)\rangle=\left[x_1+\frac{t}{T}(x_2-x_1)\right]\langle 1\rangle \tag{7-56}$$

が得られる．括弧の中の式がちょうど古典的経路 $\bar{x}(t)$ に沿っての $x(t)$ の値であることに注意しよう．

問題 7-7　2次形式の作用の場合には必ず

$$\langle x(t)\rangle = \bar{x}(t)\langle 1\rangle \qquad (7\text{-}57)$$

となることを示せ．

やや自明ではない例として，同様の自由粒子の条件に対して，遷移要素 $\langle x(t)x(s)\rangle$ を評価しよう．これは2つの時刻の関数であるから，$f(t,s)$ と書くことができる．t についての2次導関数は

$$\frac{\partial^2 f(t,s)}{\partial t^2} = \langle \ddot{x}(t)x(s)\rangle \qquad (7\text{-}58)$$

である．

この遷移要素を求めるには $F=x(s)$ を (7-40) に代入すればよい．$s\neq t$ のときは，(7-42) を導いたときの議論に沿って，$-(1/m)\langle V'[x(t)]x(s)\rangle$ が得られる．$s=t$ の場合は，(7-44) を導いたときの議論に沿って，(7-58) の遷移要素が $1/\varepsilon$ の大きさであることがわかる．ε が小さい極限で

$$m\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = \langle m\ddot{x}(t)x(s)\rangle = \frac{\hbar}{i}\delta(t-s) - \langle V'[x(t)]x(s)\rangle \qquad (7\text{-}59)$$

となる．自由粒子の場合，ポテンシャルは位置によらないから，(7-59) の右辺の第2項は0となる．その結果得られる方程式は時間領域を2つの部分に分割することにより解くことができる．$t<s$ に対して

$$f = a(s)t + b(s) \qquad (7\text{-}60)$$

とおき，$t>s$ に対して

$$f = A(s)t + B(s) \qquad (7\text{-}61)$$

とおく．

したがって t についての関数 f の1次導関数は t が s のすぐ下からすぐ上に変わるときに　$A(s)-a(s)$　だけジャンプする．(7-59) よりこのジャンプの大きさは $A(s)-a(s)=\hbar/mi$ である．

境界条件は以下のようになる．

$$\begin{aligned} \langle x(0)x(s)\rangle &= x_1\langle x(s)\rangle = x_1\bar{x}(s)\langle 1\rangle \\ \langle x(T)x(s)\rangle &= x_2\bar{x}(s)\langle 1\rangle \end{aligned} \qquad (7\text{-}62)$$

4つの関数 a，A，b，B のすべてを決めるのにはこれだけの情報では十分でない．しかし f を s について微分して得られる関係式

$$\frac{\partial^2 f}{\partial s^2}=\left(\frac{\hbar}{mi}\right)\delta(t-s) \tag{7-63}$$

を使うか，あるいは，$f(t,s)$ が t と s について対称的であるということを使うことができる．これより，関数 a，A，b，B が s について線形でなければならないという結論が得られる．従って境界条件は解を決定するのに十分である．結果は以下のようになる．

$$\langle x(t)x(s)\rangle=\begin{cases}\left[\bar{x}(t)\bar{x}(s)+\dfrac{\hbar}{miT}s(T-t)\right]\langle 1\rangle & s<t\\ \left[\bar{x}(t)\bar{x}(s)+\dfrac{\hbar}{miT}t(T-s)\right]\langle 1\rangle & t>s\end{cases} \tag{7-64}$$

この結果が正しいことは視察により理解できる．異なる時刻における2つの古典的経路の積 $\bar{x}(t)\bar{x}(s)$ は（7-59）と（7-63）の右辺を0とすることによって得られる同次方程式の解であり，必要な境界条件を満たす．(7-64)の2つの式の右辺の最後の項は（7-59）と（7-63）の特殊解で端点において0となるものである．

異なる時刻における2つの位置の積の遷移要素に含まれるのは，古典的経路に沿っての2つの位置の積だけではない．純粋に量子力学的な性質をもつ項も微小ではあるが含まれている．この付加項は量子力学的運動についてのわれわれの描像に一致するものである．固定した端点の間を運動する粒子が平均的には古典的経路に沿って見出されるとしても，他の経路にも存在する振幅をもつのである．2つの異なる時刻における位置の積の遷移要素を考える際に，このことを思い出す必要がある．遷移要素においては，あらゆるさまざまな経路に沿ってのすべての可能な位置を考慮しなければならない．これから付加項が導かれる．特定された端点においてのみ他の経路が除外されるのである．

古典論との類推の概念を再度使うことにより，上の結果の意味をよく理解することができる．ある時刻 s において，粒子の経路が特に大きな x の値を通るものとする．このとき，後の時刻における x の「平均値」は通常の平均値 $\bar{x}(t)$ とは異なる．以前の大きな偏移と相関をもつ．したがって積の「平均」は「平均」の積ではない．

このような古典論との類推において，ここに述べた「平均」というのは重み関数 $e^{iS/\hbar}$ を用いて定義されるものであることを思い起こそう．この重み関数は正値でなく実に複素数なのである．したがってわれわれが展開する量子力学的結果においては（7-64）に見られるように相関を表す付加項が純虚数となるのである．

問題 7-8　ポテンシャルが一定でなく強制調和振動子のポテンシャルの場合に，$x(t)x(s)=f(t,s)$ の遷移要素を求めよ．この際に，f に対する微分方程式を求め，次の形の解を試みよ．

$$\langle f(t,s)\rangle=[\bar{x}(t)\bar{x}(s)+g(t,s)]\langle 1\rangle \tag{7-65}$$

$g(t,s)$ が端点の値 x_1，x_2 および強制力関数［ポテンシャルの導関数 $\gamma(t)$］によらないことを示し，$g(t,s)$ についての方程式を求めよ．一般に $T=t_2-t_1$ に対して以下を示せ．

$$g(t,s)=\begin{cases}\dfrac{\hbar}{mi\omega\sin\omega T}\sin\omega s\sin\omega(T-t) & s<t\\[2mm] \dfrac{\hbar}{mi\omega\sin\omega T}\sin\omega t\sin\omega(T-s) & t<s\end{cases} \tag{7-66}$$

7-4　2次形式の作用に対する一般的結果

作用 S が2次形式の場合，多くの関数の遷移要素を求めることが容易であることは明らかである．このことから，われわれの考察をもっと一般的な汎関数の族に拡張することができると思われる．その方法は3-5節で述べたものと同じである．たとえば，2次の作用 S を使うと，$f(t)$ が時間の任意の関数であるとき，$\exp(i/\hbar)\int f(t)x(t)dt$ の遷移要素を容易に評価することができる．このような汎関数の遷移要素は次のように表される．

$$\langle e^{(i/\hbar)\int f(t)x(t)dt}\rangle=\int_a^b \mathcal{D}x(t)\ e^{(i/\hbar)[S+\int f(t)x(t)dt]} \tag{7-67}$$

もとの作用 S がガウス型であるとき，作用 S'

$$S'=S+\int f(t)x(t)dt$$

もガウス型である．したがって，(7-67) の右辺の経路積分は3-5節の方法によって計算できる．$S'_{\rm cl}$ が作用 S の極値であれば，因子 $\exp(iS'_{\rm cl}/\hbar)$ は (7-67) の経路積分の因子として取り出すことができる．残りの因子は経路 $y(t)$ についての経路積分である．これらの $y(t)$ は許された時間区間において0から0まで動くものである ($x=\bar{x}+y$ とおいた．ここで $\bar{x}$ は作用の極値に対応する古典的経路である)．

経路 y についての積分は関数 $f(t)$ に依存しない．なぜなら，この関数は S' の $x(t)$ の1次の項に乗数として現れるだけである．また前に述べたように［(3-49) 参照］残りの経路積分は S' の2次の部分だけを含むが，これは S の2次の部分そのも

のである．このことから，(7-67) の右辺の経路積分は指数関数に遷移要素 〈1〉 を掛けたものであることがわかる．結果は次のようになる．

$$\left\langle \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int f(t)x(t)dt\right]\right\rangle = \left\{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(S'_{\mathrm{cl}} - S_{\mathrm{cl}})\right]\right\}\langle 1\rangle \tag{7-68}$$

極値 S'_{cl} が得られると，それから $f(t)=0$ とおくことにより極値 S_{cl} が得られる．(3-68) で定義される強制調和振動子の作用はこの作用 S'_{cl} の特別の場合である．

問題 7-9　この結果を用いて，S が調和振動子

$$S = \frac{m}{2}\int \dot{x}^2 dt - \frac{m\omega^2}{2}\int x^2 dt$$

に対応するとき次の式が成り立つことを示せ．

$$\left\langle \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int f(t)x(t)dt\right]\right\rangle = \langle 1\rangle\left(\exp\left\{\left[\frac{i}{\hbar}\frac{m\omega}{2\sin\omega(t_2-t_1)}\right]\right.\right.$$
$$\times\left[\frac{2x_2}{m\omega}\int_{t_1}^{t_2} dt\, f(t)\sin\omega(t-t_1) + \frac{2x_1}{m\omega}\int_{t_1}^{t_2} dt\, f(t)\sin\omega(t_2-t)\right.$$
$$\left.\left.\left. - \frac{2}{m^2\omega^2}\int_{t_1}^{t_2} dt\int_{t_1}^{t} ds\, f(t)f(s)\sin\omega(t_2-t)\sin\omega(t-t_1)\right]\right\}\right)$$

ここで x_1，x_2 は振動子の初期座標と終座標である．

(7-68) で与えられる遷移要素より，$x(t)$ の遷移要素自体を別の方法で求めることができる．(7-68) を $f(t)$ について微分するものとしよう．その結果は

$$\left\langle x(t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int fx dt\right]\right\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\delta}{\delta f(t)}\left\{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(S'_{\mathrm{cl}} - S_{\mathrm{cl}})\right]\right\}\langle 1\rangle$$
$$= \frac{\delta S'_{\mathrm{cl}}}{\delta f(t)}\left\{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(S'_{\mathrm{cl}} - S_{\mathrm{cl}})\right]\right\}\langle 1\rangle \tag{7-69}$$

である．したがって両辺を $f(t)\equiv 0$ として評価すると

$$\langle x(t)\rangle = \langle 1\rangle\frac{\delta S'_{\mathrm{cl}}}{\delta f(t)}\bigg|_{f\equiv 0} \tag{7-70}$$

が得られる．

これを続けることにより 2 次導関数が得られる．

$$\langle x(t)x(s)\rangle = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\frac{\delta^2}{\delta f(t)\delta f(s)}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(S'_{\mathrm{cl}} - S_{\mathrm{cl}})\right]\bigg|_{f\equiv 0}\langle 1\rangle$$
$$= \langle 1\rangle\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\delta^2 S'_{\mathrm{cl}}}{\delta f(t)\delta f(s)} + \frac{\delta S'_{\mathrm{cl}}}{\delta f(t)}\frac{\delta S'_{\mathrm{cl}}}{\delta f(s)}\right]\bigg|_{f\equiv 0} \tag{7-71}$$

実際，$S'_{\rm cl}$ は f について 2 次式である［(3-66) を参照］から，x の任意の積の遷移要素は $\delta S'_{\rm cl}/\delta f(t)$ と $\delta^2 S'_{\rm cl}/\delta f(t)\delta f(s)$ を用いて直接評価することができる．後者は f に依存しない．このことから (7-64) と (7-65) の形が説明される．また 3 つの x の積の遷移要素が具体的に表される．

問題 7-10　任意の 2 次形式の汎関数に対して $\langle x(t)\rangle = \bar{x}(t)\langle 1\rangle$，$\langle x(t)x(s)\rangle = [\bar{x}(t)\bar{x}(s)+g(t,s)]\langle 1\rangle$ と書くとき，次の式を示せ．

$\langle x(t)x(s)x(u)\rangle = [\bar{x}(t)\bar{x}(s)\bar{x}(u)+\bar{x}(t)g(s,u)+\bar{x}(s)g(t,u)+\bar{x}(u)g(t,s)]\langle 1\rangle$

4 つの x の積の遷移要素を求めよ．［ヒント：$S'_{\rm cl}-S_{\rm cl}$ は f の 2 次式であり $f=0$ のとき 0 となるから，次のような数学的形式をとる．

$$S'_{\rm cl}-S_{\rm cl}=\frac{1}{2}\int dt\int ds\, f(t)f(s)g(t,s)+\int dt\ \bar{x}(t)f(t)$$

ここで g と $\bar{x}$ はある関数である．］

7-5　遷移要素と演算子記号

本節と続節で，遷移要素を通常の波動関数と演算子で表現するとどのようになるかを示す．これにより，通常の表現形式に慣れている読者が，経路積分の結果を既知の結果と関係づけることが容易になる．

F がある時刻における x だけの関数であるとする．たとえば時刻 t_k における関数 $V(x_k)$ を考える．このとき (7-10) より遷移要素を計算する方法が知られている．同様に F が 2 つの異なる時刻における $x(t)$ の値に依存するとき，(7-15) は計算の方法を示している．

次に F が時刻 t_k における運動量に依存する場合を考え，時間軸を長さ ε の区間に分割する近似を用いる．このとき

$$F=\frac{m}{\varepsilon}(x_{k+1}-x_k) \tag{7-72}$$

よって

$$\left\langle \chi\left|\frac{m}{\varepsilon}(x_{k+1}-x_k)\right|\psi\right\rangle_S=\frac{m}{\varepsilon}(\langle\chi|x_{k+1}|\psi\rangle_S-\langle\chi|x_k|\psi\rangle_S) \tag{7-73}$$

が得られる．(7-73) の右辺は次のように表される．

$$\frac{m}{\varepsilon}\left[\int\chi^*(x,t+\varepsilon)x\psi(x,t+\varepsilon)dx-\int\chi^*(x,t)x\psi(x,t)dx\right] \tag{7-74}$$

H が S に対応するハミルトニアンであるとき，波動方程式より

$$\psi(x,t+\varepsilon)=\psi(x,t)+\varepsilon\frac{\partial\psi}{\partial t}=\psi-\frac{i\varepsilon}{\hbar}H\psi \tag{7-75}$$

また問題4-3より

$$\chi^*(x,t+\varepsilon)=\chi^*(x,t)+\varepsilon\frac{\partial\chi^*}{\partial t}=\chi^*+\frac{i\varepsilon}{\hbar}(H\chi)^* \tag{7-76}$$

である．したがって ε の 1 次まででは

$$\int\chi^*(x,t+\varepsilon)x\psi(x,t+\varepsilon)dx=\int\chi^*(x,t)x\psi(x,t)dx$$
$$-\frac{i\varepsilon}{\hbar}\left\{\int\chi^*(x,t)x[H\psi(x,t)]dx-\int[H\chi(x,t)]^*x\psi(x,t)dx\right\} \tag{7-77}$$

となる．(4-30) によりこの最後の積分は $\int\chi^*(x,t)[Hx\psi(x,t)]dx$ と表される．演算子の記号を用いてさらに単純化すると

$$\langle\chi|m\dot{x}|\psi\rangle=-\frac{im}{\hbar}\int\chi^*(xH-Hx)\psi dx \tag{7-78}$$

これは次式と同じである．

$$-\frac{i}{\hbar}m\int\chi^*\frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial\psi}{\partial x}dx=\int\chi^*\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x}dx \tag{7-79}$$

ここで問題4-4の結果を用いた．演算子 $(\hbar/i)\partial/\partial x$ は運動量演算子と呼ばれている．もっと詳しくいうと，x 方向の運動量を表す．すでにその理由は明らかである．$m\dot{x}$ の遷移要素をつくることは χ^* と ψ の間に演算子 $(\hbar/i)\partial/\partial x$ をおくことである．これはちょうど x の遷移要素をつくることが χ^* と ψ の間に x をおくことと同等であるのと同じである．これらの関係をもっと明快に理解するためには，運動量表示を使うとよいであろう．χ と ψ の運動量表示

$$\chi(p)=\int_{-\infty}^{\infty}\chi(x)e^{-(i/\hbar)px}dx$$
$$\psi(p)=\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)e^{-(i/\hbar)px}dx \tag{7-80}$$

を用いると以下の関係式を示すことができる．

$$\int_{-\infty}^{\infty}\chi^*(x)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}dx=\int_{-\infty}^{\infty}\chi^*(p)p\psi(p)dp \tag{7-81}$$

問題 7-11　上の関係式を示せ．

この関係式のもう 1 つの見方は次のようである．

$$\langle\chi|1|\psi\rangle=\int dx_N\int dx_1\ \chi^*(x_N, t_N)K(x_N, t_N\ ;\ x_1, t_1)\psi(x_1, t_1) \tag{7-82}$$

で与えられる遷移振幅を考える．ここで x_1 軸全体が右に微小量 $\varDelta$ だけ移動したとする．新しい軸を x_1' と呼ぶことにして

$$x_1=x_1'-\varDelta \tag{7-83}$$

とおく．前の変数 x_1 でなく新しい変数 x_1' を用いても（7-82）の遷移振幅は変わらず，以下のようになる．

$$\langle\chi|1|\psi\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}dx_N\int_{-\infty}^{\infty}dx_1'\int_{x_1'}^{x_N}\mathcal{D}x(t)\ \chi^*(x_N, t_N)\exp\left\{\left(\frac{i}{\hbar}\right)\sum_{k=2}^{N-1}S[x_{k+1}, t_{k+1}\ ;\ x_k, t_k]\right.$$
$$\left.+\left(\frac{i}{\hbar}\right)S[x_2, t_2\ ;\ x_1'-\varDelta, t]\right\}\psi(x_1'-\varDelta, t) \tag{7-84}$$

ここで核についての経路積分は（2-22）の方法を用いたので具体的に表さなかった．

次に $S(x_2, t_2\ ;\ x_1'-\varDelta, t)$ と $\psi(x_1'-\varDelta, t)$ を Taylor 展開して 1 次の項のみを残す．特に指数関数は次のようになる．

$$\exp\left\{\sum_{k=1}^{N-1}\left(\frac{i}{\hbar}\right)S[x_{k+1}, t_{k+1}\ ;\ x_k, t_k]\right\}\left\{1-\left(\frac{i}{\hbar}\right)\varDelta\frac{\partial}{\partial x_1'}S[x_2, t_2\ ;\ x_1', t_1]\right\} \tag{7-85}$$

x_1' は積分変数であるから，遷移振幅を定義する積分においてダッシュ記号を省略することができる．(7-84）の形式は

$$\langle\chi|1|\psi\rangle=\int dx_2\int dx_1\chi^*(2)K(2,1)\psi(1)-\frac{i}{\hbar}\varDelta\int dx_2\int dx_1\chi^*(2)K(2,1)$$
$$\times\left\{\psi_1\frac{\partial}{\partial x_1}S[x_2, t_2\ ;\ x_1, t_1]+\frac{\hbar}{i}\ \frac{\partial}{\partial x_1}\psi(x_1, t_1)\right\} \tag{7-86}$$

となる．ここで点 x_2 は経路 $x(t)$ 上で x_1 とほんのわずかの時間間隔 ε だけ離れているものとする．つまり $t_2=t_1+\varepsilon$ である，

(7-86)の右辺の第 1 項は左辺の遷移振幅と等しい．よって右辺の残りの項は 0 となる．しかしこの残りの項は 2 つの遷移要素の組み合わせである．したがって

$$\left\langle\chi\left|-\frac{\partial}{\partial x_1}S[x_2, t_1+\varepsilon\ ;\ x_1, t_1]\right|\psi\right\rangle=\left\langle\chi\left|1\right|\frac{\hbar}{i}\ \frac{\partial\psi(x_1, t_1)}{\partial x_1}\right\rangle \tag{7-87}$$

(2-22)の方法に従って，経路の短い要素に沿って古典的作用を用いる．したがって，(7-87)に現れる作用 $S[2,1]$ は初期の経路要素に対する古典的作用である．x_1 についての導関数に負号を掛けたものは x_1 における運動量の古典的定義である．したがって次のように表す．

$$\langle \chi | p_1 | \psi \rangle = \left\langle \chi \middle| 1 \middle| \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x_1} \right\rangle \tag{7-88}$$

これは (7-78) と (7-79) で得られた結果と同じである．

相互作用の部分を部分的に消去することによって得られる S の複雑な式を扱う場合にしばしば，時刻 t における運動量に対応する汎関数 $p(t)$ を特定したくなる．前段階で述べたことから一般的定義が示唆される．t 以前の時刻に対応するすべての座標が $-\Delta$ だけ移動した場合に，遷移振幅 $\langle \chi | 1 | \psi \rangle$ の1次の変化は $\langle \chi | p(t) | \psi \rangle$ に Δ を掛けたものである．この原理から運動量汎関数はどんなに複雑な S に対しても得られる．同様にしてハミルトニアンすなわちエネルギーは時間変数を移動することにより定義できる．このことは7-7節で触れる．

問題 7 -12　V が位置のみによる任意の関数であるとき，次の式が成り立つことを示せ．

$$\left\langle \chi \middle| \frac{dV}{dt} \middle| \psi \right\rangle = \left\langle \chi \middle| \frac{V(x_{k+1}) - V(x_k)}{\varepsilon} \middle| \psi \right\rangle$$

$$= \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \chi^* (HV - VH) \psi \, dx \tag{7-89}$$

V が時間にも依存する場合を考えよ．dV/dt の遷移要素は演算子 $(i/\hbar)(HV - VH) + \partial V/\partial t$ の遷移要素と等価であることを示せ．

問題 7 -13

$$\langle \chi | m\ddot{x} | \psi \rangle = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \chi^* (Hp - pH) \psi dx \tag{7-90}$$

が成り立つことを示し，任意の物理量 A が何らかの演算子の形で与えられているとき，dA/dt が $\partial A/\partial t + (i/\hbar)(HA - AH)$ と等しいことを示せ．

次に，速やかに続けて測定される2つの量を含む式 F を考える．たとえば，

$$F = \frac{m(x_{k+1} - x_k)}{\varepsilon} x_k \tag{7-91}$$

明らかに

$$\langle \chi | F | \psi \rangle = \frac{1}{\varepsilon} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \, \chi^*(x\,;\,t+\varepsilon) m x K(x, t+\varepsilon\,;\, y, t) y \psi(y, t)$$

$$- \frac{1}{\varepsilon} \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \chi^*(x, t) m x^2 \psi(x, t) \tag{7-92}$$

となる．ここで $t=t_k$ である．(4-2) から (4-12) を導いたときに見たように，次の式が成り立つ．

$$\int_{-\infty}^{\infty} K(x, t+\varepsilon\,;\, y, t) f(y) dy = f(x) + \frac{i\varepsilon}{\hbar} H f(x) \tag{7-93}$$

したがって (7-92) の最初の積分は

$$\frac{1}{\varepsilon}\int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x, t+\varepsilon) mx\left(1+\frac{i\varepsilon}{\hbar}H\right) x\psi(x, t)\, dx \tag{7-94}$$

である．(7-76) により χ^* を表し，H のエルミート性を使うと，この積分が以下のようになることがわかる．

$$\frac{1}{\varepsilon}\int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x, t)\left(1-\frac{i\varepsilon H}{\hbar}\right) mx\left(1+\frac{i\varepsilon}{\hbar}H\right) x\psi(x, t) dx$$

$$=\frac{1}{\varepsilon}\int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x, t) mx^2\psi(x, t) dx + \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x, t) m(xH-Hx) x\psi(x, t) dx \tag{7-95}$$

したがって

$$\left\langle \chi \middle| m\frac{x_{k+1}-x_k}{\varepsilon} x_k \middle| \psi \right\rangle = \frac{i}{\hbar}\int \chi^*(x, t) m(xH-Hx) x\psi(x, t) dx$$

$$=\int \chi^*(x, t) px\psi(x, t) dx \tag{7-96}$$

が得られる．ここで最後の計算に (7-78) を用いた．これは次のような一般的規則の 1 例である：時系列に対応する物理量の組の遷移要素を表す積分式を書く際に，対応する演算子を遷移要素の時間の順序に従って右から左に書く．それらの物理量の間に有限の時間間隔 Δt がある場合は，K あるいは演算子 $e^{-(i/\hbar)S\Delta t}$ を挿入しなければならない．（たとえば，問題7-16を見よ．）2 つの物理量の間の時間間隔 ε が 0 に漸近するとき K はデルタ関数に漸近し，上の一般的規則が得られる．

問題 7-14　$(m/\varepsilon)(x_{k+1}-x_k) f(x_{k+1})$ の遷移振幅が $(f\cdot p)$ と等しいことを示せ．

問題 7-15　続いている運動量についてもこの規則が成り立つことを示せ．すなわち

$$\left\langle \chi \middle| m\frac{x_{k+1}-x_k}{\varepsilon}\; m\,\frac{x_k-x_{k-1}}{\varepsilon} \middle| \psi \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \chi^*(x, t) pp\psi(x, t)$$

$$=-\hbar^2\int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x, t)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x, t) \tag{7-97}$$

問題 7-16　$t_l > t_k$ のとき $t_l = t$，$t_k = s$ ならば次の式が成り立つことを示せ．

$$\left\langle\chi\left|x_l\frac{m(x_{k+1}-x_k)}{\varepsilon}\right|\psi\right\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dy\,\chi^*(x,t)K(x,t\,;\,y,s)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}\right)\psi(y,s)\quad(7\text{-}98)$$

$t_l<t_k$ のときはどうなるか．

運動量の 2 乗 p^2 は pp，すなわち 2 つの継起する速度に質量を掛けたものに対応することに注意．（問題7-15を見よ．）これは 1 つの時刻における速度の 2 乗 $\langle\chi|m^2(x_{k+1}-x_k)^2/\varepsilon^2|\psi\rangle$ には対応しない．なぜなら，7-3節，特に (7-49) で見たように $\varepsilon\to0$ のときに $m\hbar/i\varepsilon$ のように発散する．この式 $m\hbar/i\varepsilon$ と (7-97) の左辺との差は実際この極限で p^2 である．すなわち

$$\left\langle\chi\left|\frac{m^2(x_{k+1}-x_k)^2}{\varepsilon^2}\right|\psi\right\rangle=\frac{m\hbar}{i\varepsilon}\langle\chi|1|\psi\rangle+\left\langle\chi\left|m\frac{x_{k+1}-x_k}{\varepsilon}m\frac{x_k-x_{k-1}}{\varepsilon}\right|\psi\right\rangle\quad(7\text{-}99)$$

問題 7-17　上式を証明せよ．ただし $F=m(x_{k+1}-x_k)/\varepsilon$ として (7-40) を用いよ．

7-6　ベクトルポテンシャルについての摂動展開

(7-49) に示したように速度の 2 乗の遷移要素が特異性をもつことの結果として，速度を含む多くの式を解釈する際には注意が必要である．たとえば，電磁場中の粒子のラグランジアンは

$$L=\frac{m}{2}|\dot{\mathbf{r}}|+eV(\mathbf{r},t)-\frac{e}{c}\dot{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\quad(7\text{-}100)$$

である．$V=0$ とし，ベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ を摂動としてその効果を求めてみよう．すなわち，$S_0=(m/2)\int|\dot{\mathbf{r}}|^2dt$，$\sigma=-(e/c)\int\dot{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r},t)dt$ として摂動の扱いに有効な級数展開を行い，遷移要素を求める．すなわち，

$$\langle e^{i\sigma/\hbar}\rangle_{S_0}=\langle1\rangle_{S_0}+\frac{i}{\hbar}\langle\sigma\rangle_{S_0}-\frac{1}{2\hbar^2}\langle\sigma^2\rangle_{S_0}+\cdots\quad(7\text{-}101)$$

1 次の項は $-ie/\hbar c$ に次の式を掛けたものである．

$$\left\langle\int\dot{\mathbf{r}}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)dt\right\rangle_{S_0}\quad(7\text{-}102)$$

これを演算子の記法に翻訳してみよう．不連続な経路（時間の長さ ε のステップのつながり）に対して σ を定義する際に，次のうちのいずれかの式になると期待できよう．

$$\sigma=-\frac{e}{c}\sum_k(\mathbf{r}_{k+1}-\mathbf{r}_k)\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r}_k,t)\quad(7\text{-}103)$$

または

$$\sigma=-\frac{e}{c}\sum_k(\mathbf{r}_{k+1}-\mathbf{r}_k)\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r}_{k+1},\ t_{k+1}) \tag{7-104}$$

いずれも連続的経路の極限では σ に対する積分を与える．しかし $\boldsymbol{A}$ の特定の成分，たとえば A_x を見ると，$A_x(\mathbf{r}_{k+1},\ t_{k+1})$ と $A_x(\mathbf{r}_k,\ t_k)$ との差は近似的に

$$(\mathbf{r}_{k+1}-\mathbf{r}_k)\cdot\nabla\boldsymbol{A}_x+\varepsilon\frac{\partial\boldsymbol{A}_x}{\partial t} \tag{7-105}$$

であることがわかる．これにさらに $\mathbf{r}_{k+1}-\mathbf{r}_k$ を掛けるとそれぞれの k に対して 2 次の量である（k について和をとると ε 程度の量となる）と期待される．しかしこの経路は連続ではなく $x_{k+1}-x_k$ の 2 乗平均の遷移要素は 1 次の量である．実際（問題7-6を見よ），ε の 1 次まででは

$$(x_{k+1}-x_k)^2\approx-\frac{\hbar\varepsilon}{mi}$$

$$(x_{k+1}-x_k)(y_{k+1}-y_k)\approx0$$

$$(y_{k+1}-y_k)^2\approx-\frac{\hbar\varepsilon}{mi}$$

などとなる．したがって（7-103）と（7-104）の差は近似的に

$$\sum_k\frac{\hbar\varepsilon}{mi}\nabla\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r}_k,\ t_k)=\frac{\hbar}{mi}\int\nabla\cdot\mathbf{A}\,dt \tag{7-106}$$

であり，0 次である．したがってどちらの式が正しいか決着をつける必要がある．

このような問いに対する一般的解答は第 2 章で述べた．そこでの規則は S を $\sum_k S_{\text{cl}}(x_{k+1},\ t_{k+1}\ ;\ x_k,\ t_k)$ で置き換えるというものであった．ここで S_{cl} は 1 点から隣接する点へ行く古典的作用である．この作用を厳密に計算する必要はないが曖昧さを十分精密に除く必要がある．（7-103）と（7-104）はこの目的のため十分なほどには精密に計算されていない．しかし短時間に対する古典的作用は次の式に非常に近い．

$$S_{\text{cl}}[k+1,\ \ k]=\frac{m|\mathbf{r}_{k+1}-\mathbf{r}_k|^2}{2\varepsilon}+\frac{1}{2}[\mathbf{A}(\mathbf{r}_{k+1},\ t_{k+1})+\mathbf{A}(\mathbf{r}_k,\ t_k)]\cdot(\mathbf{r}_{k+1}-\mathbf{r}_k) \tag{7-107}$$

したがって σ に対する正しい式は（7-103）と（7-104）の平均であり，（7-99）の遷移要素は

$$\left\langle\sum_k(\mathbf{r}_{k+1}-\mathbf{r}_k)\cdot1/2[\mathbf{A}(\mathbf{r}_{k+1},\ t_{k+1})+\mathbf{A}(\mathbf{r}_k,\ t_k)]\right\rangle \tag{7-108}$$

である．k についての和は後で評価する（時間についての積分として）こととし，結

果は演算子 $(1/2m)(\mathbf{p}\cdot\mathbf{A}+\mathbf{A}\cdot\mathbf{p})$ として表される（問題 7-12を見よ）.

すなわち，電磁場ポテンシャルの中で摂動展開の 1 次の項は，(6-11) で与えられている 1 次の項と同じ形をしている．ただし V を演算子 $-e/(2cm)(\mathbf{p}\cdot\mathbf{A}+\mathbf{A}\cdot\mathbf{p})$ で置き換えたものである.

この結論は 2 次については正しくない．2 次の項については次の式を求める必要がある.

$$\frac{1}{2}\left(\frac{e}{\hbar c}\right)^2\left\langle\left[\int\dot{\mathbf{r}}\,\mathbf{A}(\mathbf{r},t)dt\right]^2\right\rangle=\frac{1}{2}\left(\frac{e}{\hbar c}\right)^2\sum_k\sum_l\left\langle\left\{[\mathbf{r}_{k+1}-\mathbf{r}_k]\cdot\frac{1}{2}[\mathbf{A}(\mathbf{r}_{k+1},t_{k+1})\right.\right.$$
$$\left.\left.+\mathbf{A}(\mathbf{r}_k,t_k)]\right\}\left\{[\mathbf{r}_{l+1}-\mathbf{r}_l]\cdot\frac{1}{2}[\mathbf{A}(\mathbf{r}_{l+1},t_{l+1})+\mathbf{A}(\mathbf{r}_l,t_l)]\right\}\right\rangle \tag{7-109}$$

$k\neq l$ の項について特に特別なことはない．実際 2 次の項を精密に求めることができ，その結果は (6-13) において V を $-e/(2cm)(\mathbf{p}\cdot\mathbf{A}+\mathbf{A}\cdot\mathbf{p})$ で置き換えたときに期待されるものである．しかし $l=k$ のときは 2 つの速度が一致することにより新しい項が生じる．(7-49) と問題7-6を見ると，次の付加項が得られる.

$$\frac{e^2}{2c^2}\left\langle\frac{i\varepsilon}{\hbar m}\sum_k\left\{\frac{1}{2}[\mathbf{A}(\mathbf{r}_{k+1},t_{k+1})+\mathbf{A}(\mathbf{r}_k,t_k)]\right\}^2\right\rangle \tag{7-110}$$

これは $(ie^2/2\hbar mc^2)\int[\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r},t)]dt$ と等価でありポテンシャル $(e^2/2mc^2)\mathbf{A}\cdot\mathbf{A}$ の 1 次の作用と同じ効果をもつ.

したがって，ベクトルポテンシャルの作用についての摂動展開は (6-17) と同じ形をしている．ポテンシャル V は演算子 $-e/2mc(\mathbf{p}\cdot\mathbf{A}+\mathbf{A}\cdot\mathbf{p})+e^2/2mc^2\mathbf{A}\cdot\mathbf{A}$ で置き換えられる．$\mathbf{A}$ について 2 次まで示したが，少し考えるとこれは任意の次数で正しいことがわかる.

ベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ 中の粒子のハミルトニアンは

$$H=\frac{1}{2m}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\cdot\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right) \tag{7-111}$$

である．これと自由粒子のハミルトニアン $[(1/2m)\mathbf{p}\cdot\mathbf{p}]$ との差は演算子 $-(e/2mc)(\mathbf{p}\cdot\mathbf{A}+\mathbf{A}\cdot\mathbf{p})+(e^2/2mc^2)\mathbf{A}\cdot\mathbf{A}$ である．これは上に述べた結果を得るためのもっと容易な方法である.

7-7　ハミルトニアン

これまで導いてきたことを用いると，ハミルトニアンに対する遷移振幅を書き下すことはとても易しいように思われる．運動量の 2 乗に対する遷移振幅をとり $2m$

で割って，ポテンシャルに対する遷移振幅を加える．このようにして時刻 t_k におけるハミルトニアン自体を次のように書くことができよう．

$$H_k=\frac{m}{2}\left(\frac{x_{k+1}-x_k}{\varepsilon}\right)\left(\frac{x_k-x_{k-1}}{\varepsilon}\right)+V(x_k) \tag{7-112}$$

一方，演算子の形式ではハミルトニアンの遷移要素は

$$\langle\chi|H_k|\psi\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\chi^*\left[\frac{p^2}{2m}+V(x)\right]\psi dx=\int_{-\infty}^{\infty}\chi^*H\psi dx \tag{7-113}$$

である．

ハミルトニアンに対する遷移振幅を定義するこの方法は完全に正しい結果を与えるものであるが，いくぶん不自然である．なぜならこれはハミルトニアンと時間の間の重要な関係を表現しないからである．したがって，次にこの遷移要素に対する別の定義を考える．これは，時間をずらせたときに起こる状態変化を調べることを基礎としているものである．この方法においては，S の形が与えられさえすれば，それがどんなに複雑であっても H_k を定義することが可能である．

このことを調べるために，ちょうど経路積分を定義したときのように時間軸を無限小の区間に分割する．しかしここでは，時間を同じ長さの区間に分割することは必要でないことに注意しておこう．明らかに，同じ区間に分割することは全く必要ないのである．時間をどんな時刻 t_i に分割しようとも満足できるものである．極限操作は，最大の時間間隔 $t_{i+1}-t_i$ を 0 に収束させることによって表現される．

単純化のために，1 粒子の 1 次元運動を考えよう．作用は次のような和で表される．

$$S=\sum_i S[x_{i+1}, t_{i+1}\,;\,x_i, t_i] \tag{7-114}$$

ここで

$$S[x_{i+1}, t_{i+1}\,;\,x_i, t_i]=\int_{t_i}^{t_{i+1}}L[\dot{x}(t), x(t)]dt \tag{7-115}$$

この式で積分は (x_i, t_i) と (x_{i+1}, t_{i+1}) の間の古典的経路について行う．ここでの 1 次元の例では，十分よい近似で次のように書くことができる．

$$S[x_{i+1}, t_{i+1}\,;\,x_i, t_i]=\left[\frac{m}{2}\left(\frac{x_{i+1}-x_i}{t_{i+1}-t_i}\right)^2-V(x_{i+1})\right](t_{i+1}-t_i) \tag{7-116}$$

時刻 t_i における dx_i についての積分に伴う規格化定数は前に用いたものと同じである．すなわち，

$$A=\left[\frac{2\pi\hbar i(t_{i+1}-t_i)}{m}\right]^{1/2} \tag{7-117}$$

時間のずれに対する状態の変化と H との関係をこれから調べる．時空のある領域 R において定義される状態 $\psi(t)$ を考える．同じ時刻に別の領域 R_δ で定義される状態 $\psi_\delta(t)$ を想像してみよう．領域 R_δ は時間 δ だけ以前であるということを除けば R と全く同じであると仮定する．すなわち，全体として時間 δ だけ過去に動かしたものとする．R_δ において系を準備するのに要する装置はすべて R において系を準備する装置と同じであって違いは前者が δ だけ早く操作されることである．L が時間に陽に依存する場合，L もずらす．すなわち，状態 ψ_δ は状態 ψ に対して用いた L から得られるが，ψ_δ に対応する L_δ において時間変数を $t+\delta$ とする．

状態 ψ_δ は ψ とどれだけ異なるのであろうか．いかなる測定においても，系がある固定した領域 R' に見出される確率は，もとの領域が R か R_δ かによって異なる．時間を δ だけ動かすことによって生じる遷移要素 $\langle\chi|1|\psi_\delta\rangle$ の変化分を考える．この変化は，$i\leq k$ に対しては t_i のすべての値を δ だけ減少させ $i>k$ についてはすべての t_i をそのままにして得られるものと考えられる．

この点においてこの先の見通しを得た読者は，困難が待っていることに思い当たるであろう．明らかに，実際，すべての微小な時間間隔が0になるという極限をとるというのがわれわれの意図するところである．しかしながら，このままのやりかたでは，少なくとも1つの時間間隔 $t_{k+1}-t_k$ が下限をもつので無限に小さくすることができない．この困難は時間のずれ δ 自身が時間の関数であると仮定することにより解決することができる．時間のずれが滑らかに $t=t_k$ 以前に始まり $t=t_k$ 以後に滑らかになくなるものと考える．このとき時間変分 δ を固定して，$t_{k+1}-t_k$ も含めすべての時間間隔を滑らかに0にする．そして δ を0に収束させることによりこの時間のずれの1次の効果を調べる．このより厳密な手続きによって得られる結果は，本質的に本節の例で用いている手続きによる結果と同じである．

時間のずれの効果を調べることに立ち戻ってみると，(7-115) で定義された作用 $S[x_{i+1},t_{i+1};x_i,t_i]$ は t_{i+1} と t_i がともに同じだけ変化するかぎり変わらない．一方，$S[x_{k+1},t_{k+1};x_k,t_k]$ は $S[x_{k+1},t_{k+1};x_k,t_k-\delta]$ に変わる．さらに，dx_k についての積分に伴う定数 A も変化し

$$A_k=\left[\frac{2\pi\hbar i(t_{k+1}-t_k+\delta)}{m}\right]^{1/2} \tag{7-118}$$

となる。

(7-2)を用いて遷移要素を定義する。経路積分が作用 S と規格化定数 A の両方に依存する（両方とも時間移動によって変化している）ことを考慮すると，遷移要素の δ について 1 次の変化を

$$\langle\chi|1|\psi\rangle-\langle\chi|1|\psi_\delta\rangle=-\frac{i\delta}{\hbar}\left\langle\chi\left|\frac{\partial S[x_{k+1}, t_{k+1}\,;\,x_k, t_k]}{\partial t_k}+\frac{\hbar}{2i(t_{k+1}-t_k)}\right|\psi\right\rangle \quad (7\text{-}119)$$

と表すことができる。第 2 項は A の変化からきている。量子力学のハミルトニアンに対応する汎関数を次のように定義したい。

$$H_k=\frac{\partial S[x_{k+1}, t_{k+1}\,;\,x_k, t_k]}{\partial t_k}+\frac{\hbar}{2i(t_{k+1}-t_k)} \quad (7\text{-}120)$$

右辺の第 1 項は古典的ハミルトニアンの定義である。第 2 項は量子力学的定義において必要な項で，時間間隔 $t_{k+1}-t_k$ が 0 になるときに H_k が有限となるようにするためのものである。最後の項は時間移動 δ による規格化定数 A の変化の結果である。

この結果を (7-116) に表されている 1 次元の例に応用してみると，演算子 H_k を次のように書くことができる。

$$\begin{aligned}H_k&=\frac{m}{2}\left(\frac{x_{k+1}-x_k}{t_{k+1}-t_k}\right)^2+\frac{\hbar}{2i(t_{k+1}-t_k)}+V(x_{k+1})\\&=\frac{m}{2}\left(\frac{x_{k+1}-x_k}{t_{k+1}-t_k}\right)\left(\frac{x_k-x_{k-1}}{t_k-t_{k-1}}\right)+V(x_k)\end{aligned} \quad (7\text{-}121)$$

2 番目の式は (7-54) で得られた結果によるものである。速度の積を 2 つの相続く速度の積で表すと，一見異質な項 $\hbar/[2i(t_{k+1}-t_k)]$ を避けることができる。

すべての $t<t_k$ に対して $t_\delta=t-\delta$ という関係を使うと，

$$\psi(t)=\psi(t_\delta)+\delta\frac{\partial\psi}{\partial t}=\psi_\delta+\delta\frac{\partial\psi}{\partial t} \quad (7\text{-}122)$$

が得られる。これは 2 つの領域 R，R_δ で定義される関数 ψ を結び付けるものである。したがって(7-119)，(7-120)，(7-122)を組みあわせると，演算子と Schrödinger 方程式と経路積分を結び付ける関係は閉じるのである。

$$\delta\left\langle\chi\left|1\right|\frac{\partial\psi}{\partial t}\right\rangle=-\frac{i}{\hbar}\delta\langle\chi|H_k|\psi\rangle \quad (7\text{-}123)$$

これよりふたたび Schrödinger 方程式が得られる。

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi \quad (7\text{-}124)$$

時刻 t より前のすべての時刻を $-\delta$ だけ移動させたときの遷移要素 $\langle\chi|1|\psi\rangle$ の 1 次の変化を求め，これを $\delta\langle\chi|H(t)|\psi\rangle$ と書くことにより，任意の複雑な作用に対してハミルトニアン（すなわち，エネルギーに対応する汎関数）の表現が得られる．

第8章　調和振動子

調和振動子の問題はおそらく量子力学の中でもっとも簡単な問題である．調和振動子の運動の核が*

$$K(x_b, T\,;\,x_a, 0)=\left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega T}\right)^{1/2}\times\exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\sin\omega T}[(x_a^2+x_b^2)\cos\omega T-2x_ax_b]\right\} \tag{8-1}$$

であることを使って問題を完全に解いた．これを思う存分使うためには，厳密にせよ近似的にせよ調和振動子に関わるあらゆる問題を見てみる必要がある．そのような問題について述べるのがこの章の目的である．この計画を極端まで進め，あらゆる種類の古典的振動問題，板，棒などを含めることができる．しかしそのような系は巨大であるから量子力学的補正を解析するのは時間の浪費にしかすぎない．代わりに，系を原子の大きさで見るのがよい．たとえば，CO 分子の振動を解析する．そのとき，炭素と酸素の間のポテンシャルエネルギーは厳密には2次式でない．しかしながら，低エネルギー状態についてはポテンシャルは2次式で近似でき，純粋な調和振動子の取り扱いは多くの場合よい近似である．

もっと複雑な多原子分子において励起エネルギーがあまり高くないならば，原子の運動する範囲は原子間の間隔に較べて小さい．この場合も，ポテンシャルエネルギーはほぼ座標の2次関数になる．したがって系は近似的に連成調和振動子の集まりとして近似される．固体結晶は，ある意味で，大きな多原子分子と考えられる．すなわち，相互作用する調和振動子が無限に配列されているものである．

考えられるもう1つの例は，空洞の中の電磁場である．古典的には定在波のいろいろなパターンすなわちモードがあり，そこで場は一定の振動数で調和振動を行っている．量子力学では，これらのモードのひとつひとつが量子的振動子である．

---

*） p.60，問題3-8参照．

8-1 単純な調和振動子

Schrödinger 方程式の解　この節では，単純な1次元調和振動子を記述する諸関係式を述べる．Schrödinger 方程式の表現を使って話を始めるとしよう．問題2-2によると一次元調和振動子を記述するラグランジアンは

$$L=\frac{m}{2}(\dot{x}^2-\omega^2x^2) \tag{8-2}$$

である．対応するハミルトニアンは

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{m}{2}\omega^2x^2 \tag{8-3}$$

であり，この章で扱う．

波動方程式は

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}&=H\psi\\&=\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{m}{2}\omega^2x^2\right)\psi\end{aligned} \tag{8-4}$$

である．

ハミルトニアンが時間に依存しないので，波動関数は容易に変数分離でき，一定のエネルギーE_nの定常状態の波動関数が得られる． 時間に依存する部分は，$\exp(iE_nt/\hbar)$ に比例する．

運動量演算子 p が x についての微分に対応すること (7-5節) を思い起こすと，波動関数の空間部分に対して Schrödinger 方程式を次のように書くことができる．

$$H\phi_n=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi_n}{\partial x^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}\phi_n=E_n\phi_n \tag{8-5}$$

この方程式は容易に解くことができる．その結果は多くの量子力学の教科書に出ている*)．エネルギー固有値は

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right). \tag{8-6}$$

ここで n は整数0，1，2，…である．固有関数 ϕ_n は

$$\phi_n=(2^nn!)^{-1/2}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)e^{-(m\omega x^2/2\hbar)}. \tag{8-7}$$

---

*) L.I. Schiff, *Quantum Mechanics* 2d. ed. (McGraw-Hill Book Company, New York, 1955)

ここで関数 H_n はエルミート多項式である．

$$H_0(y)=1$$
$$H_1(y)=2y$$
$$H_2(y)=4y^2-2$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$
$$H_n(y)=(-1)^n e^{y^2}\frac{d^n}{dy^n}e^{-y^2} \tag{8-8}$$

エルミート多項式は母関数

$$e^{-t^2+2ty}=\sum_{n=0}^{\infty} H_n(y)\frac{t^n}{n!} \tag{8-9}$$

を使うとうまく定義できる．

別の方法でこれらの結果を得ることができる．関数 ϕ_n はある微分方程式を解くことによって得られた．すなわち，時間に依存しない場合である．しかしながら時間に依存する場合について解をすでに得ている．この解より関数 ϕ_n を直接求めることができる．この導出を行い前の章で得られた公式を導いてみることは教育的である．

核からの解　問題3-8において振動子の運動を記述する核を求めた．他方，(4-59) よりこの核が時間の指数関数とエネルギー固有関数の積で展開できることがわかっている．すなわち，

$$\left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega T}\right)^{1/2}\exp\left(\frac{im\omega}{2\hbar\sin\omega T}[(x_1^2+x_2^2)\cos\omega T-2x_1x_2]\right)$$
$$=\sum_{n=0}^{\infty} e^{-(i/\hbar)E_nT}\phi_n(x_2)\phi_n^*(x_1) \tag{8-10}$$

次に関係式

$$i\sin\omega T=\frac{1}{2}e^{i\omega T}(1-e^{-2i\omega T})$$
$$\cos\omega T=\frac{1}{2}e^{i\omega T}(1+e^{-2i\omega T}) \tag{8-11}$$

を用いて，(8-10) の左辺を次のように書くことができる．

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}e^{-(i\omega T/2)}(1-e^{-2i\omega T})^{-1/2}$$
$$\times\exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}\left[(x_1^2+x_2^2)\left(\frac{1+e^{2i\omega T}}{1-e^{2i\omega T}}\right)-\frac{4x_1x_2e^{-i\omega T}}{1-e^{2i\omega T}}\right]\right\} \tag{8-12}$$

(8-12) を $e^{-i\omega T}$ のべきで展開すると (8-10) の右辺の形をした級数が得られる. 初めの因子 $e^{-i\omega T/2}$ があるので, 展開のすべての項は $n=0, 1, \cdots$ に対して $e^{-i\omega T/2}e^{-in\omega T}$ という形をしていることがわかる. このことはエネルギー準位が

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{8-13}$$

で与えられることを意味する.

波動関数を求めるために展開を完全に行わなければならない. この方法を $n=2$ まで具体的に示そう. (8-10) の左辺をこの次数まで展開すると, 次の式が得られる.

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-i\omega T/2}\left(1+\frac{1}{2}e^{-2i\omega T}+\cdots\right)\exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_1^2+x_2^2)\right.$$
$$\left.-\frac{m\omega}{\hbar}(x_1^2+x_2^2)(e^{-2i\omega T}+\cdots)+\frac{2m\omega}{\hbar}x_1x_2e^{-i\omega T}+\cdots\right] \tag{8-14}$$

すなわち,

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-(m\omega/2\hbar)(x_1{}^2+x_2{}^2)}e^{-i\omega T/2}\left(1+\frac{1}{2}e^{-2i\omega T}\right)$$
$$\times\left[1+\frac{2m\omega}{\hbar}x_1x_2e^{-i\omega T}+\frac{4m^2\omega^2}{2\hbar^2}x_1^2x_2^2e^{-2i\omega T}\right.$$
$$\left.-\frac{m\omega}{\hbar}(x_1^2+x_2^2)e^{-2i\omega T}\cdots\right] \tag{8-15}$$

これより最低次の係数を拾い出すことができる. それは

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-(m\omega/2\hbar)(x_1{}^2+x_2{}^2)}e^{-(i\omega T/2)}=e^{-(i/\hbar)E_0T}\phi_0(x_2)\phi_0^*(x_1) \tag{8-16}$$

である. これより $E_0=\hbar\omega/2$ および

$$\phi_0(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}e^{-(m\omega x^2/2\hbar)} \tag{8-17}$$

が得られる. ここで ϕ_0 を実数に選んだ. 因子 $e^{i\delta}$ を付けることによって複素数にすることもできる. ここで δ は定数である. しかしながらこれによって物理的結果は変わらない.

展開の次項は

$$e^{-i\omega T/2}e^{-i\omega T}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}e^{-(m\omega/2\hbar)(x_1{}^2+x_2{}^2)}\frac{2m\omega}{\hbar}x_1x_2=e^{-(i/\hbar)E_1T}\phi_1(x_2)\phi_1^*(x_1) \tag{8-18}$$

である. これより $E_1=3/2\hbar\omega$ および

$$\phi_1(x)=\left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}x\phi_0(x) \tag{8-19}$$

が得られる．

次の項は $E_2=5/2\hbar\omega$ に対応する．x_1 と x_2 に依存する部分は

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}e^{-(m\omega/2\hbar)(x_1{}^2+x_2{}^2)}\left[\frac{2m^2\omega^2}{\hbar^2}x_1^2x_2^2-\frac{m\omega}{\hbar}(x_1^2+x_2^2)+\frac{1}{2}\right] \tag{8-20}$$

である．これは $\phi_2(x_2)\phi_2^*(x_1)$ と同じでなければならない．括弧の中の式は

$$\frac{1}{2}\left(\frac{2m\omega}{\hbar}x_1^2-1\right)\left(\frac{2m\omega}{\hbar}x_2^2-1\right) \tag{8-21}$$

と表されるから，

$$\phi_2(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{2m\omega}{\hbar}x^2-1\right)\phi_0(x) \tag{8-22}$$

が得られる．これらの結果は（8-7）と（8-8）で与えられている波動関数の解から得られたものと一致している．

すべての波動関数をこのようにして求めることができる．しかしながら，この展開から直接的に ϕ_n に対する一般的な式を求めることは困難な代数問題である．間接的な方法を以下の問題で示す．

問題 8-1　任意の状態 $f(x)$ から他の状態 $g(x)$ に行く振幅は(7-1)で定義されたような遷移振幅 $\langle g|1|f\rangle$ であることに注意する．

$f(x)$ と $g(x)$ が直交関数 $\phi_n(x)$ によって展開されたとする．これらの直交関数は4-2節で述べたように核 $K(2,1)$に対応する波動方程式の解であるとする．すなわち，

$$f(x)=\sum f_n\phi_n(x) \qquad g(x)=\sum g_n\phi_n(x)\,. \tag{8-23}$$

係数 f_n，g_n と(4-59)を用いて，遷移振幅が次のように表されることを示せ．

$$\iint g^*(x_2)K(x_2,T\,;x_1,0)f(x_1)dx_1dx_2=\sum g_n^*f_ne^{-(i/\hbar)E_nT} \tag{8-24}$$

次にある特別な関数の組 f，g を選び，(8-24) の右辺の展開が簡単になるようにする．このとき関数 f_n が得られたあと，(8-23)の展開から波動関数 ϕ_n についての情報が得られることが予想される．f，g を次のように選ぶものとしよう．

$$f(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}e^{-(m\omega/2\hbar)(x-a)^2} \tag{8-25}$$

$$g(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}e^{-(m\omega/2\hbar)(x-b)^2} \tag{8-26}$$

これらの関数はそれぞれ a, b を中心とするガウス分布を表す．これらを $f_n=f_n(a)$, $g_n=f_n(b)$ と表す．f, g がそれぞれ (8-25), (8-26) で与えられていて，核は調和振動子の核 (8-1) であるとき，遷移振幅 $\langle f|1|g\rangle$ を決めよ．(8-24) の積分を実行して

$$\exp\left[-\frac{i\omega T}{2}-\frac{m\omega}{4\hbar}(a^2+b^2-2abe^{-i\omega T})\right]=\sum_n f_n(a)f_n^*(b)e^{-(i/\hbar)E_nT} \tag{8-27}$$

となることを示せ．この結果から $E_n=\hbar\omega(n+1/2)$ および

$$f_n(a)=\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{n/2}\frac{a^n}{\sqrt{n!}}\exp\left(-\frac{m\omega a^2}{4\hbar}\right) \tag{8-28}$$

を示せ．

この結果を (8-24) に用い，ϕ_n を (8-7) で与えられている式で表せ．ここで $H_n(x)$ はまだ未知であるとする．これより関数 $H_n(x)$ に対する母関数 (8-9) を導け．

8-2　多原子分子

前の節で単純な調和振動子を記述する波動関数とエネルギー準位を導いた．この節では相互作用する振動子系の例として，まず多原子分子を調べる．分子内のそれぞれの原子の位置を記述する座標を決める．特定の原子 a の位置は 3 つの座標 x_a, y_a, z_a によって与えられる．それらの座標の原点は原子の平衡位置にとる．原子の質量を m_a とすると全体系の運動エネルギーは次の式で与えられる．

$$\sum_a \frac{1}{2}m_a(\dot{x}_a^2+\dot{y}_a^2+\dot{z}_a^2) \tag{8-29}$$

ここで和は分子内のすべての原子についてとる．

この一般的議論にとっては，次のような修正を行うことにより，ベクトル的記述を避けるほうがよい．N 個の原子があるとして，次のように $n=3N$ 個のデカルト座標を定義する．

$$q_1=\sqrt{m_a}\,x_a,\quad q_2=\sqrt{m_a}\,y_a,\quad q_3=\sqrt{m_a}\,z_a,\quad q_4=\sqrt{m_b}\,x_b,\quad q_5=\sqrt{m_b}\,y_b,\quad \cdots \tag{8-30}$$

これらの新しい座標を使うと運動エネルギーは

$$(\text{運動エネルギー})=\sum_{j=1}^{n}\frac{1}{2}\dot{q}_j^2 \tag{8-31}$$

となる．

ポテンシャルエネルギーはすべての変位の関数 $V(q_1, q_2, \cdots)$ である．V を平衡位置 $q_j=0$ のまわりでテイラー級数に展開することができる．

$$V(q_1, q_2, \cdots, q_n) = V(0, 0, \cdots, 0) + \sum_{j=1}^{n} q_j V_j(0, 0, \cdots, 0)$$
$$+ \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{2} \sum_{k=1}^{n} q_j q_k V_{jk}(0, 0, \cdots, 0) + \cdots \tag{8-32}$$

ここで

$$V_j = \frac{\partial V}{\partial q_j}, \quad V_{jk} = \frac{\partial^2 V}{\partial q_j \partial q_k} \tag{8-33}$$

である．第 1 項は平衡におけるポテンシャルエネルギーである．これは q に依存しない定数である．この一定のポテンシャルの値を 0 とし，すべての他のポテンシャルエネルギーをこの決め方に矛盾しないように決める．このようにして第 1 項は展開から省略される．因子 $V_j(0, 0, \cdots, 0)$ は次の項に現れる．これは座標 q に付随するポテンシャル勾配すなわち力であり，平衡位置で評価された値である．したがってこの因子は 0 であるから，級数から省略される．別の言い方をすれば，平衡位置がポテンシャルエネルギーの極小値に対応するので，平衡位置のまわりの変位について 1 次の変化は 0 とならなければならないのである．

次の項に現れる因子 $V_{jk}(0, 0, \cdots)$ は，分子の構造に依存する定数の集合をなす．これらを v_{jk} と表すことにしよう．ここですべての高次の項を無視することにする．すなわちポテンシャルエネルギーに含まれるのは 2 次までの座標である．ポテンシャルエネルギーが純粋に座標の 2 次の関数でなくても，われわれの近似は小さい変位に対して有効である．分子を調和振動子の系として表すのはこの近似によるのである．

(8-31) と (8-32) を結び付けると，ラグランジアンを次のように書くことができる．

$$L = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n} \dot{q}_j^2 - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n} \sum_{k=1}^{n} q_j q_k v_{jk} \tag{8-34}$$

次に，分子内の原子の運動を記述する核を定義する経路積分にラグランジアン (8-34) を代入すると，

$$K = \int \mathcal{D} q_1(t) \int \mathcal{D} q_2(t) \cdots \int \mathcal{D} q_n(t)$$
$$\times \exp\left\{ \frac{i}{2\hbar} \int dt \left[\sum_{j=1}^{n} \dot{q}_j^2(t) - \sum_{j=1}^{n} \sum_{k=1}^{n} v_{jk} q_j(t) q_k(t) \right] \right\} \tag{8-35}$$

ここですべての経路積分はガウス積分である．よって3-5節で述べた方法により解くことができる．解を求めるために，作用積分の停留値を与える経路 $q_j(t)$ を求めなけ

ればならない．それぞれの q_j に関する変分を行うと，求める経路は次の方程式の解として得られる．

$$\ddot{q}_j = -\sum_{k=1}^{n} v_{jk} q_k \tag{8-36}$$

この式の意味は，１つの原子に働く力のそれぞれの成分がすべての原子の変位の１次結合で表されるということである．

このように相互作用する振動子の系は，古典論の観点から詳しく解析されてきた．量子力学の多くの問題において，核を求めるための第１段階として古典的作用を求めるので，これらの古典論の研究は大変役に立つ．古典論の解析の重要な結果の１つは次のことである．ある特定な分子変形をすると後の運動が単純な周期的正弦型となるということである．変形のパターンは同じままで，変形の大きさだけが時間とともに正弦的に変化する．いろいろな変形のパターン，すなわちモードは一般に異なる振動数に対応する．振動数０のモードも存在する可能性があり，また一群のモードがすべて同じ振動数をもつ可能性もある．重要なことは，分子の任意の微小変形の運動がこれらのモードの１次結合でつくられるということである．

分子中に N 個の原子がある場合は，$n=3N$ 個のモードがある．したがってたとえば CO_2 分子は９個のモードをもつ．図8-1ではそれぞれの原子の運動を矢印で示してある．１から４までのモードのみが周期的である（すなわち０でない振動数をもつ）．それぞれ初めの半周期の運動の方向を示してある．次の半周期についてはすべての矢印の方向を逆にすればよい．

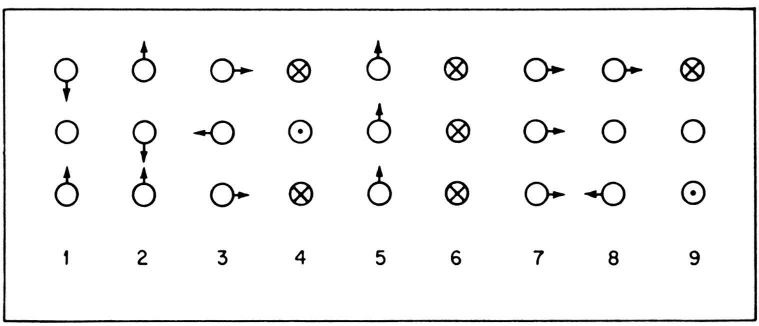


図8-1　CO_2 分子の規準モード．記号⊙は紙面から外向きの運動を表し，⊗は紙面に向かう運動を表す．**1** から **4** までのモードは周期的である．**5-7**のモードは連続的な並進運動である．**8**，**9** のモードは連続的な回転運動である．

次にモードの数学的表現を導こう．もちろんこの導出は量子力学というよりは古典物理学の一部である．振動数 ω のモードを考えよう．すべての座標 q_j は一緒に同じ振動数で動く．モードごとに異なる初期変位 a_i の組を考える．すべての原子の初速度を0とする初期条件に対して，その後の座標の運動は

$$q_j = a_j \cos \omega t \tag{8-37}$$

と表される．この式を（8-36）に代入すると

$$\omega^2 a_j = \sum_{k=1}^{n} v_{jk} a_k \tag{8-38}$$

が得られる．

この最後の式は実際 n 個の未知数 a_j に対する n 個の連立方程式である．この方程式は同次であるから係数の行列式が0のときのみ解をもつ．これより次の式が成り立たなければならない．

$$\begin{vmatrix} \omega^2 - v_{11} & -v_{12} & \cdots & -v_{1n} \\ -v_{21} & \omega^2 - v_{22} & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ -v_{n1} & \cdots & \cdots & \omega^2 - v_{nn} \end{vmatrix} = 0 \tag{8-39}$$

この ω に対する方程式は n 個の解をもつ．特定の解 ω_α に対して連立方程式(8-38)の解が得られる．この解を $a_{j\alpha}$ と表す．定数 $a_{j\alpha}$ の相対的な大きさは決まるが，絶対値は任意である．絶対値は

$$\sum_{j=1}^{n} a_{j\alpha}^2 = 1 \tag{8-40}$$

を満たすように決める．この操作を n 個のモード $\alpha=1, 2, \cdots, n$ のすべてについてくりかえす．n 個の ω_α の値を決め，それぞれの ω_α の値に対して n 個の定数 $a_{j\alpha}$ が求められる．系の可能なすべての運動はこれらのモードの1次結合である．一般のタイプの運動に対する表式は

$$q_j = \sum_{\alpha=1}^{n} C_\alpha a_{j\alpha} \cos(\omega_\alpha t + \delta_\alpha) \tag{8-41}$$

と表される．ここで振幅の定数 C_α と位相定数 δ_α は初期条件に依存する．この式が系の運動を表現するということは，（8-41）を（8-36）に代入することによって確かめられる．

（8-41）の代わりに複素数表示を使うと便利である．すなわち

$$q_j = \sum_{\alpha=1}^{n} C_\alpha a_{j\alpha} e^{i\omega_\alpha t} e^{i\delta_\alpha} = \sum_{\alpha=1}^{n} c_\alpha a_{j\alpha} e^{i\omega_\alpha t} \tag{8-42}$$

ここで式の中の実数部分のみが物理的意味をもつ．複素数定数 c_α は初期条件に依存し次のようにして決まる．初期位置と速度をそれぞれ $q_j(0)$, $\dot{q}_j(0)$ とすると次の式が得られる．

$$q_j(0) = \mathrm{R_e} \sum_{\alpha=1}^{n} c_\alpha a_{j\alpha} = \sum_{\alpha=1}^{n} (\mathrm{R_e} c_\alpha) a_{j\alpha}$$

$$\dot{q}(0) = \mathrm{R_e} \sum_{\alpha=1}^{n} i c_\alpha a_{j\alpha} \omega_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{n} \{-(\mathrm{Im} c_\alpha) \omega_\alpha a_{j\alpha}\} \tag{8-43}$$

定数 $a_{j\alpha}$ はすべて実数であるから，この 2 組の方程式は c_α の実数部と虚数部を決定する．

(8-48) で表されている重要な性質を使うと (8-43) を簡単に解くことができる．まず，(8-48) を証明しよう．任意の α に対して定数 $a_{j\alpha}$ は

$$\omega_\alpha^2 a_{j\alpha} = \sum_{k=1}^{n} v_{jk} a_{k\alpha} \tag{8-44}$$

を満たす．この方程式に $a_{j\beta}$ を掛けて j のすべての値について和をとると

$$\omega_\alpha^2 \sum_{j=1}^{n} a_{j\alpha} a_{j\beta} = \sum_{k=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} v_{jk} a_{k\alpha} a_{j\beta} \tag{8-45}$$

が得られる．係数 v_{jk} は対称的であるから (8-45) の左辺は α と β を交換しても変わらない．このことから

$$(\omega_\alpha^2 - \omega_\beta^2) \sum_{j=1}^{n} a_{j\alpha} a_{j\beta} = 0 \tag{8-46}$$

となる．よって振動数 ω_α と ω_β が異なるならば

$$\sum_{j=1}^{n} a_{j\alpha} a_{j\beta} = 0 \tag{8-47}$$

でなければならない．2 つの振動数が同じならば，定数 $a_{j\alpha}$ は決まらないが，任意に選ぶことができる．この任意性を用いて (8-47) が $\alpha \neq \beta$ について成り立つようにすることができる．よって (8-40) で定義される規格化を用いて次のように書くことができる．

$$\sum_{j=1}^{n} a_{j\alpha} a_{j\beta} = \delta_{\alpha\beta} \tag{8-48}$$

ここで $\delta_{\alpha\beta}$ はクロネッカーのデルタである．

(8-43) より c_α の実数部を容易に求めることができる．(8-43) の最初の式に $a_{j\beta}$ を掛けてから j のすべての値について和をとる．右辺の $\alpha = \beta$ 以外の項はすべて 0

となる．これより

$$\mathrm{Re}\, c_\beta=\sum_{j=1}^{n} a_{j\beta}q_j(0) \tag{8-49}$$

が得られる．同様にして

$$\mathrm{Im}\, c_\beta=-\frac{1}{\omega_\beta}\sum_{j=1}^{n} a_{j\beta}\dot{q}_j(0) \tag{8-50}$$

が得られる．系の任意の運動を完全に記述するには，系の基準モードと運動の初期条件が与えられればよい．

8-3 基準座標

系の運動を解析するもう 1 つの方法を述べる．もとの座標の特別な 1 次結合である新しい座標の組 $Q_\alpha(t)$ をとる．

$$Q_\alpha(t)=\sum_{j=1}^{n} a_{j\alpha}q_j(t). \tag{8-51}$$

一方，もとの座標は新しい座標を用いて次のように表される．

$$q_j(t)=\sum_{\alpha=1}^{n} a_{j\alpha}Q_\alpha(t) \tag{8-52}$$

(8-48) を用いると，系の運動エネルギーは

$$\text{運動エネルギー}=\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\dot{q}_j^2=\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}a_{j\alpha}a_{j\beta}\dot{Q}_\alpha\dot{Q}_\beta=\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{n}\dot{Q}_\alpha^2 \tag{8-53}$$

と表される．ポテンシャルエネルギーは

$$V=\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}v_{jk}q_jq_k=\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\sum_{\alpha=1}^{n}\sum_{\beta=1}^{n}v_{jk}a_{j\alpha}a_{k\beta}Q_\alpha Q_\beta \tag{8-54}$$

となる．(8-38) より

$$\sum_{k=1}^{n}v_{jk}a_{k\beta}=\omega_\beta^2 a_{j\beta} \tag{8-55}$$

が得られる．つまり，(8-48) を用いると，ポテンシャルエネルギーは

$$V=\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\sum_{\alpha=1}^{n}\sum_{\beta=1}^{n}\omega_\beta^2 a_{j\beta}a_{j\alpha}Q_\alpha Q_\beta=\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{n}\omega_\alpha^2 Q_\alpha^2 \tag{8-56}$$

と表される．したがって (8-34) のラグランジアンは新しい変数を用いて

$$L=\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{n}(\dot{Q}_\alpha^2-\omega_\alpha^2 Q_\alpha^2) \tag{8-57}$$

と表される．

この形のラグランジアンは相互作用をしない独立な調和振動子の集まりを表す．

すなわち，変数が分離されたのである．各々の振動子は単位質量をもち，各々固有の振動数 ω_α をもつ．特定の振動子に対する運動方程式は

$$\ddot{Q}_\alpha = -\omega_\alpha^2 Q_\alpha \tag{8-58}$$

である．この意味は，各々の振動子が他のすべての振動子とは独立に固有の振動数で自由に振動しているということである．(8-49) と (8-50) を (8-51) と較べると，c_β の実数部と $-c_\beta\omega_\beta$ の虚数部が各々ちょうどモード β の初期座標 $Q_\beta(0)$ と初速度 $\dot{Q}_\beta(0)$ となっていることがわかる．よって複雑な分子も独立な調和振動子の単純な集まりと等価である．

この新しい座標の組を使って，系を独立な振動子の集まりとして記述することができるのであるが，この組を基準座標系と呼ぶ．(8-57)で与えられるラグランジアンを用いて，系の運動を記述する経路積分を，基準座標によって次のように表すことができる．

$$K = \int \mathcal{D}Q_1 \mathcal{D}Q_2 \cdots \mathcal{D}Q_n \exp\left[\frac{i}{2\hbar}\sum_{\alpha=1}^{n}\int dt(\dot{Q}_\alpha^2 - \omega_\alpha^2 Q_\alpha^2)\right] \tag{8-59}$$

この最後の結果は，(8-35) に具体的に $q_j(t) = \sum_\alpha^n a_{j\alpha} Q_\alpha(t)$ を代入することにより直接導くことができる．指数部分は古典論とまったく同様に簡単になり，また等式 $\mathcal{D}q_1 \mathcal{D}q_2 \cdots \mathcal{D}q_n = \mathcal{D}Q_1 \mathcal{D}Q_2 \cdots \mathcal{D}Q_n$ も少なくとも定数の因子を除いて成り立つ(変換が1次であるからヤコビアンは定数である．このような定数は経路積分の規格化因子の定義の中に含めることができる)．

この形の経路積分は経路積分の積に分解できる．よって

$$K = \prod_\alpha^n \int \mathcal{D}Q_\alpha \exp\left[\frac{i}{2\hbar}\int dt(\dot{Q}_\alpha^2 - \omega_\alpha^2 Q_\alpha^2)\right] \tag{8-60}$$

ここで各々の経路積分は唯一のモードを記述する．各々のモードは単純な1次元振動子であり，その解はすでに得られている．このようにして相互作用をしている調和振動子の問題はすべて解析が可能である．

核の経路積分は，経路積分の積に分解できるから，ある与えられたエネルギー状態にある系の波動関数は3-8節で述べたように，それぞれのモードの波動関数の積として表されることになる．

8-1節で示したように，各々の分離したモードの波動関数は $\exp(iE_n/\hbar)$ に比例する．ここで E_n はモード n のエネルギーである．このような波動関数の積は $\exp[(it/\hbar)\sum_n E_n]$ に比例する．これより，振動子系の全エネルギーがそれぞれ別別のモードのエネルギーの和であることがわかる．モード α のエネルギーは

$\hbar\omega_\alpha(m_\alpha+1/2)$ である．ここで m_α は整数である．よって全系のエネルギーは

$$E=\hbar\omega_1(m_1+1/2)+\hbar\omega_2(m_2+1/2)+\cdots+\hbar\omega_n(m_n+1/2) \qquad (8\text{-}61)$$

と表される．ここで m_1，m_2，…はすべて整数である（0 も含む）．それぞれの整数を独立にとることができる．なぜなら振動子 1 と振動子 2 の励起は異なっていてよいからである．

$\phi_n(Q)$ が n 番目の準位にある調和振動子の波動関数である［(8-7) に与えられている］とすると，全系の波動関数は

$$\phi_{m_1}(Q_1)\phi_{m_2}(Q_2)\cdots\phi_{m_n}(Q_n)=\prod_{\alpha=1}^{n}\phi_{m_\alpha}(Q_\alpha) \qquad (8\text{-}62)$$

となる．それぞれの ϕ_{m_α} は (8-7) で与えられているもので ω を ω_α で置き換えたものである．このように，古典力学では基準モードを決め，量子力学では単純な調和振動子のエネルギー準位と波動関数を決めるのであるが，この両者を結び付けることによって，多原子分子のエネルギー準位と固有関数についての完全解を求めることができるのである．

変換方程式 (8-51) を用いると，もとの座標 $q_i(t)$ で波動関数を表すことができる．たとえば，系の最低のエネルギー状態はエネルギー $\dfrac{\hbar}{2}\sum_{\alpha=1}^{n}\omega_\alpha$ をもつが，その波動関数は

$$\begin{aligned}\Phi_0&=\prod_{\alpha=1}^{n}\exp\left(-\frac{Q_\alpha^2}{2\omega_\alpha}\right)=\exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{n}\frac{Q_\alpha^2}{\omega_\alpha}\right)\\&=\exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\frac{a_{j\alpha}a_{k\alpha}q_jq_k}{\omega_\alpha}\right)\end{aligned} \qquad (8\text{-}63)$$

である．すなわち，波動関数は 2 次形式

$$-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}M_{jk}q_jq_k$$

の指数関数である．ここで行列要素 M_{jk} は

$$M_{jk}=\sum_{\alpha=1}^{n}\frac{a_{j\alpha}a_{k\alpha}}{\omega_\alpha} \qquad (8\text{-}64)$$

である．

問題 8 - 2　行列 M_{jk} は行列 v_{jk} の逆 2 乗根であることを示せ．すなわち，

$$\sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n}M_{jk}M_{kl}v_{lm}=\delta_{jm} \qquad (8\text{-}65)$$

いくつかの振動数 ω が 0 となることがある．たとえば，分子 CO_2 について図8-1に示した 5 から 9 までのモードはすべて 0 の振動数をもつ．これらは分子全体の並進，回転に対応し，これらの運動には復元力が存在しない．復元力がないから座標 Q が小さいという仮定は一般には正しくないので，並進・回転の運動エネルギーについては，もっと厳密な解析が必要である．この章での議論では，そのような運動は重要でないのでこれらのモードと座標は存在しないかまたは励起されないものと仮定し，$\omega \neq 0$ のモードを扱ってきたのである．ある α に対して，解 ω_α^2 が負となるとき(つまり ω は虚数となる)，このモードの運動に対して系は不安定な平衡状態にある．これはちょうど，鉛筆の芯を下にして鉛直に立てた場合のようなものである．単純な調和振動をする代わりに，運動は指数的に発散するので Q_α は微小なままに留まらない．この場合もここでの議論で重要でないので，そのようなモードはないものとする．

8-4　1 次元結晶

単純なモデル　結晶は大きな多原子分子が 3 次元の配列に拡がったものとみなすことができる．結晶のことを学ぶのに，まず図8-2のような 1 次元の線上に等間隔で同種原子が並んでいるという簡単な場合を調べよう．それぞれの原子の質量を 1 とし，j 番目の原子の平衡位置からの変位を q_i とする．運動の方向は原子配列の線上に限られているものとする．すなわち縦方向の運動のみを考える．次に各々の原子は隣の原子とのみ相互作用するものとし，そのポテンシャル $V(R)$ は 2 原子間の距離 R に依存する．すなわち，原子はバネによって結ばれていると考えるのである．平衡状態における間隔はポテンシャルの極小値に対応する．この極小値を 0 とする．平衡変位からのずれを ΔR とする．(8-32) と同様に ΔR のべきでポテンシャルを展開する．平衡状態からの変位は小さいものとし，展開において 2 次より高次の項を

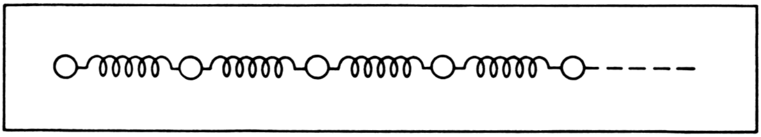


図8-2　1 次元「結晶」の模型．直線上に等間隔で質点が並び，隣接する粒子はバネで結ばれている．

無視する．j 番目と $j+1$ 番目の原子の間の間隔は，平衡状態の間隔から $q_{j+1}-q_j=\Delta R_{j,j+1}$ だけずれているものとする．変位に関するポテンシャルの2次の導関数を ν^2 と表す（ν の値は弦上の原子のすべてについて同じである）．このような変位によるポテンシャルエネルギーは

$$V_{j,j+1}=\frac{1}{2}\nu^2(q_{j+1}-q_j)^2 \tag{8-66}$$

となり，ラグランジアンは次のように表される．

$$L=\sum_{j=1}^{N}\frac{1}{2}\dot{q}_j^2-\sum_{j=1}^{N-1}\frac{\nu^2}{2}(q_{j+1}-q_j)^2 \tag{8-67}$$

左端の原子（$j=1$）と右端の原子（$j=N$）が結合されていない場合はポテンシャルエネルギーの式の中で $j=N$ の項を省かなければならない．

このラグランジアンを基礎にして，線上に並んでいる原子に対する運動方程式は

$$\ddot{q}_j=\nu^2[(q_{j+1}-q_j)-(q_j-q_{j-1})] \tag{8-68}$$

となる．ここで j として端点 $j=1$, $j=N$ を除く．端点については別に考察しなければならないという難点があるが，これは多くの問題において大して重要なことではない．通常，大きな固体の全体としての性質に興味があるのだから，表面や境界の効果は問題とならない．このような場合，求める主要な結果は境界条件の与え方に実際依存しない．（すなわち，端の原子が自由であるか固定されているかによらない．）この問題を避けるために，理論物理学者は周期的境界条件と呼ばれる特別に簡単な境界条件を仮定する．これによると，端点は特別な考慮を必要としなくなる．このような境界条件が実際の系で実現されることはまれであるが，境界条件に依存しない現象に対して，この方法は有用である．

考え方は次のようである．原子は端点 N をこえても存在するものとし，$(N+j)$ 番目の原子の変位が j 番目の原子の変位と常に厳密に等しいとする．したがって境界条件は

$$q_{N+j}=q_j,\quad \dot{q}_{N+j}=\dot{q}_j \tag{8-69}$$

となる．この境界条件は，真珠の首飾りのように環状に弦が結ばれている場合に正しい．しかしながら，3次元の場合，この境界条件を表現する現実的描像はなく，完全に人工的である．

この特別な境界条件の価値は次のようである．弦の端を決めるもっとも一般的な方法では（たとえば，端の原子を剛体壁に固定するとか，端の原子を自由にするな

ど）弦を伝播する波動の反射を生み出す．端の原子が同じ性質の原子からなる他の弦と結ばれている場合のみ反射が起こらない．よって，この境界条件は反射を防ぐために伝送線を特性インピダンスにつなぐことに類似している．特性インピダンスは無限の伝送線をつなぐことと等価である．われわれの場合，弦を同じ弦につなぐことによってこれを実現しているのである．この境界条件を周期的というのは，弦の中の k 点で起こることは，$N+k$ 点や，$2N+k$ 点でもくりかえされるからである．この境界条件を用いると，原子の運動に対する（8-68）はすべての原子に対して，正しい．

古典的運動方程式の解　変位 q は振動数 ω で周期的変動をするものとし，次の式を解く．

$$-\omega^2 q_j=\nu^2(q_{j+1}-2q_j+q_{j-1}) \tag{8-70}$$

この連立方程式を行列式の形に表すこともでき，その行列式方程式は数学の定理によって評価することができる．しかしこのことは方程式が直接解けるということを意味するのであるから，直接解いてしまうほうが簡単である．

記号 i は $\sqrt{-1}$ を意味するものとし添え字としては用いないことにする．解は次のようになる．

$$q_j=Ae^{i(j\beta-\omega t)}=a_j e^{-i\omega t} \tag{8-71}$$

ここで β は離散的な値をとる定数である．これが解であることは（8-70）に代入することによって確かめられる．振動数は

$$-\omega^2=\nu^2(e^{i\beta}-2+e^{-i\beta})=-4\nu^2\sin^2\frac{\beta}{2} \tag{8-72}$$

で与えられる．ここで β によって ω の値が与えられているが，β のすべての値が許されているわけではない．周期的境界条件より $\beta=2\pi\alpha/N$ である．α は整数であり，$\alpha=1,\ 2,\ \cdots N-1$.（$\alpha=0$ の場合は並進運動であるから，これは無視できる．さらに $\alpha=N+\alpha'$ の場合の振動は α' の場合と同じである．）よって特定の α の値に対して振動数は

$$\omega_\alpha=2\nu\sin\frac{\pi\alpha}{N} \tag{8-73}$$

となる．この振動数に対する j 番目の座標の振幅は

$$a_{j\alpha}=Ae^{i2\pi\alpha j/N} \tag{8-74}$$

である．

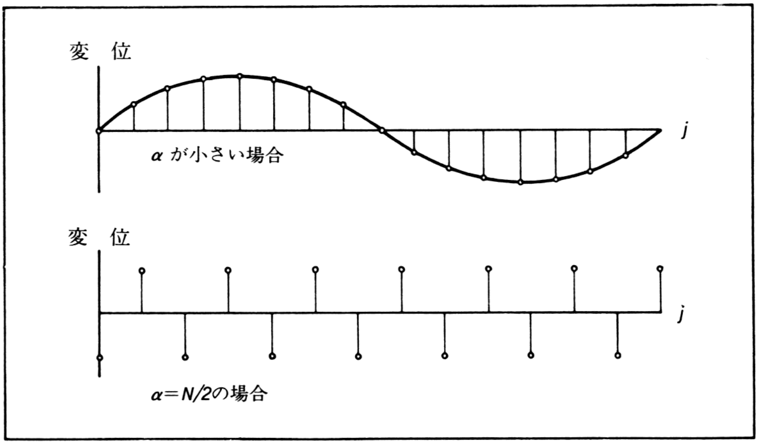


図8-3　ひもの上に並んでいる原子の変位を縦軸にし，横軸には等間隔に並んでいる平衡位置 j を示す．上図の場合，波長は原子間隔と比較して長い（α が小さい）．下図の場合，$\alpha=N/2$ であり，変位はもはや滑らかな正弦波の様相を示さない．

前の式で求められた定数 $a_{j\alpha}$ は複素数である．α と $-\alpha$（あるいは α と $N-\alpha$）に対する解の結合をとることにより，この定数を実数にすることができる．しかしながらそのまま複素数の形にしておくほうが便利である．また，α の値として正と負と両方を考えると便利な場合がある．たとえば N が奇数のときは，α の値域として，0 から $N-1$ ではなく $-1/2(N-1)$ から $+1/2(N-1)$ をとる．

弦上の原子の相対変位は α の大きさによる．α の 2 つの値（α の小さい場合と $\alpha=N/2$ の場合）に対応する振動の様子を図8-3に示した．

それぞれの定数 $a_{j\alpha}$ の相対的な大きさは（8-74）によって決まるが，定数 A によって決まる全体の大きさは任意である．これを（8-48）と類似の規格化方程式によって決定する．A を次のように決める．

$$\sum_{j=1}^{N} a_{j\alpha}^{*} a_{j\beta} = \delta_{\alpha\beta} \tag{8-75}$$

これより

$$A = \frac{1}{\sqrt{N}} \tag{8-76}$$

となる．

ここでそれぞれのモードを基準座標で表現することができる．

$$Q_\alpha=\sum_{j=1}^{N}a_{j\alpha}q_j=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N}q_j e^{i2\pi\alpha j/N} \tag{8-77}$$

ここで（8-42）と同様に $q_i=\sum_{\alpha=1}c_\alpha a_{j\alpha}e^{-i\omega_\alpha t}$ である．これらの座標も複素数であるが，これらによって表現されるラグランジアンは次のように実数である．

$$L=\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{N}(\dot{Q}_\alpha^*\dot{Q}_\alpha-\omega_\alpha^2 Q_\alpha^* Q_\alpha) \tag{8-78}$$

複素数の座標を用いることに関して一言述べておく必要がある．q_i は物理的座標であるから実数である．よって (8-77) は $Q_\alpha^*=Q_{-\alpha}$ を意味する．すなわち，それぞれの複素座標 Q_α を特定するのに 2 つの実数が必要であるが，全体では N 個の独立な実数があればよい．実数座標を用いたいならば，以下のような 2 つの実数 Q_α^C, Q_α^S を座標とすればよい．

$$Q_\alpha=(Q_\alpha^C-iQ_\alpha^S)\frac{1}{\sqrt{2}} \tag{8-79}$$

$$\begin{cases} Q_\alpha^C=\dfrac{1}{\sqrt{2}}(Q_\alpha+Q_{-\alpha}) \\ Q_\alpha^S=\dfrac{i}{\sqrt{2}}(Q_\alpha-Q_{-\alpha}) \end{cases} \tag{8-80}$$

このとき α の値は 0 から $N-1$ までとなる．運動エネルギーの項を実数座標で表すと

$$\frac{1}{2}[(\dot{Q}_\alpha^C)^2+(\dot{Q}_\alpha^S)^2]=\dot{Q}_\alpha\dot{Q}_{-\alpha}=\dot{Q}_\alpha\dot{Q}_\alpha^* \tag{8-81}$$

となる．[(8-78) に因子 1/2 がふたたび現れている．なぜなら，α の正負のすべての値について和をとるのでそれぞれの項を 2 度数えることになるからである．$Q_{-\alpha}^*Q_{-\alpha}=Q_\alpha Q_\alpha^*$] よって実数量について以前に求めた 2 次形式は，ここでは複素数にその複素共役を掛けたものの和となる．[（8-75）を見よ．]

問題 8-3　Q_α^C, Q_α^S が基準座標で，それぞれ定在波 $\sqrt{2}\cos(2\pi j\alpha/N)$, $\sqrt{2}\sin(2\pi\alpha j/N)$ を表すことを示せ．すなわち，N が奇数のとき，次のようになる．

$$q_j=\sum_{\alpha=0}^{\frac{1}{2}(N-1)}Q_\alpha^C\sqrt{2}\cos\frac{2\pi\alpha j}{N}+\sum_{\alpha=0}^{\frac{1}{2}(N-1)}Q_\alpha^S\sqrt{2}\sin\frac{2\pi\alpha j}{N} \tag{8-82}$$

問題 8-4　（8-78）のラグランジアンに対する基底状態の波動関数が次のように表されることを示せ．

$$\Phi = A \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{N}\frac{Q_\alpha^* Q_\alpha}{\omega_\alpha}\right) \tag{8-83}$$

ここで A は定数である．これを導く際に，波動関数を実数変数 Q_α^C, Q_α^S で表すことから始めよ．

問題 8 - 5　初期状態と終状態に対して同じ波動関数を用いて得られる遷移要素を**期待値**と呼ぶ．(8-83) の基底状態についての F の期待値*) は

$$\langle \Phi_0 | F | \Phi_0 \rangle = \int dQ_0 \cdots \int dQ_N \, \Phi_0^* F \Phi_0 \tag{8-84}$$

である．次の期待値が正しいことを示せ．

$$\begin{aligned} &\langle \Phi_0 | Q_\alpha | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | Q_\alpha^* | \Phi_0 \rangle = 0 \\ &\langle \Phi_0 | Q_\alpha^2 | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | Q_\alpha^{*2} | \Phi_0 \rangle = 0 \\ &\langle \Phi_0 | Q_\alpha^* Q_\alpha | \Phi_0 \rangle = \frac{1}{2\omega\alpha} \langle \Phi_0 | 1 | \Phi_0 \rangle \\ &\alpha \neq \beta \text{ に対しては}\quad \langle \Phi_0 | Q_\alpha^* Q_\beta | \Phi_0 \rangle = 0 \end{aligned} \tag{8-85}$$

基準座標で表されるラグランジアンを用いて，系を独立な調和振動子の集まりに帰着できた．量子力学的な解は多原子分子の場合と同様に直接的に導かれる．単純な 1 個の独立の調和振動子に対する量子力学の解がわかっていればよい．

問題 8 - 6　原子間の結合が最近接原子間だけでなく，k 個だけ離れている原子間に λ_k という強さの結合があるときでも，定数 $a_{j\alpha}$ が同じ形であることを示せ．大きな k に対して λ_k が十分急速に減衰するものとして，このような結合があるときの振動数 ω_α の値を求めよ．この場合ポテンシャルエネルギーは (8-66) で与えられるのではなく，同様の式ではあるがすべての原子対の相対変位を含むものである．そしてそれらの相対変位の 2 乗には λ_k が乗じられている．すなわち，

$$V = \frac{\nu^2}{2}\sum_k \sum_j \lambda_k (q_{k+j} - q_j)^2$$

8 - 5　連続体近似

前節で求めた特別なモードは，直線上にある原子が隣接する原子と位相差をもって振動するというモードである．原子の列に沿って伝播する振動の波があり，隣り

*)　この「期待値」の定義と，5-3節（特に (5-46)）で与えられる演算子の「平均値」の定義とを比較せよ．

合う原子の位相差が小さいとき，波長は長い.

特に興味深いのは，長波長モードにおける原子の振る舞いである．波長が原子間隔よりもずっと大きい場合は，この原子間隔は重要ではない．この場合，運動は仮想的な「連続媒質」の概念で大変よく記述される．原子の列は，単位長さ当たりの質量 $\rho=1/d$ (それぞれの原子が単位質量をもつものとしたことを思い起こそう) というような平均的性質をもつ連続体（棒）とみなすことができる．物理的には，実際の棒は原子の離散的集合なのであるが，この節では原子の列を連続な弦で置き換えるという連続体近似について述べる.

運動のモード α に対して隣接する原子の位相差は $2\pi\alpha/N$ であるから，1波長の中に N/α 個の原子が含まれる．すなわち，d を隣接する原子間の平衡間隔とすると，波長は $\lambda=Nd/\alpha$ である．波数は

$$k=\frac{2\pi}{\lambda}=\frac{2\pi\alpha}{Nd} \tag{8-86}$$

である.

波動的側面は運動の数学的表現において記号を少し変えるとはっきりする．それぞれのモードを α の値でなく k の値で表すことにする．よってモード α について和をとることは k の離散的値について和をとることである．k の値は $2\pi/L$ に整数を掛けたものである．ここで $L=Nd$ は弦の長さである．$x_j=jd$ を j 番目の原子の平衡位置とする．このとき原子の運動を記述する方程式は次のようになる.

$$a_{jk}=\frac{1}{\sqrt{N}}e^{ikx_j} \tag{8-87}$$

$$Q_k=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N}q_je^{ikx_j} \tag{8-88}$$

$$q_j=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k=1}^{N}Q_ke^{-ikx_j} \tag{8-89}$$

$$\omega_k=2\nu\sin\frac{kd}{2} \tag{8-90}$$

原子間の間隔は攪乱が変動する長さに較べて非常に小さいものとする．これまでに定義した記号を用いると，このような状況は $kd\ll 1$ で表される．積 $\nu d=c$ を定義すると，kd が小さい場合 $\omega\simeq kc$ となる．この状況では座標 q_i を原子列に沿っての位置の関数とみなすことができる．すなわち，j 番目の原子の変位を図8-3の上の図のように表すことができる．長波長の場合，変位 $q(x_i)$ と $q(x_i+1)$ はほとんど等し

いので，関数 $q(x)$ を位置の関数として定義された滑らかな連続関数とみなすことができる．基準座標 Q_k は $q(x)$ のフーリエ変換である．すなわち，(8-88) は

$$Q(k)=\frac{\sqrt{N}}{L}\int_0^L dx\ q(x)e^{ikx} \tag{8-91}$$

で置き換えられる．この置き換えは次の近似関係式を基礎としている．

$$\sum_{j=1}^{N}(\quad)_j \simeq \frac{N}{L}\int_0^L dx(\quad) \tag{8-92}$$

離散的な点の間の間隔が非常に小さいとき，この近似はよくなる．

同様の関係式，

$$\sum_{k=1}^{N}(\quad)_k \simeq \frac{L}{2\pi}\int_0^{2\pi/d} dk(\quad) \tag{8-93}$$

により逆変換

$$q(x)=\frac{L}{2\pi\sqrt{N}}\int_0^{2\pi/d} dk\ Q(k)e^{-ikx} \tag{8-94}$$

が導かれる．

これらの量にもっと直接的物理的意味をもたせるために，j 番目の原子の実際の変位を u_j と表すことにしよう．すなわち，$q_j=\sqrt{m}u_j$ とおく．ここで m は1個の原子の質量であり，ρd と等しい．u のフーリエ変換を U とする．すなわち，

$$U(k)=\int_0^L dx\ u(x)e^{ikx} \tag{8-95}$$

とおき，逆変換を

$$u(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\ U(k)e^{-ikx} \tag{8-96}$$

とおく．新しい基準座標は $U(k)$ である．以前の基準座標 $Q(k)$ との関係は次のようになる．

$$U(k)=\frac{\sqrt{mL}}{\sqrt{N}}Q(k) \tag{8-97}$$

$u(x,t)$ を用いて運動エネルギーを表すには，(8-92) を使う．

$$\text{運動エネルギー}=\frac{1}{2}\int dx\ \rho\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)^2 \tag{8-98}$$

新しい変数によってポテンシャルエネルギーを表すためには，2つの隣接する原子の変位の差を位置の連続関数として表す必要がある．連続体近似を用いると，次のように書くことができる．

$$q_{j+1}-q_j=\sqrt{m}[u(x_{j+1},t)-u(x_j,t)]\simeq d\sqrt{m}\frac{\partial u}{\partial x} \tag{8-99}$$

これよりポテンシャルエネルギーが

$$V=\frac{\nu^2 d^2}{2}\frac{m}{d}\int_0^L dx\ \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2=\frac{\rho c^2}{2}\int_0^L dx\ \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 \tag{8-100}$$

となることがわかる．

最後の式で定数 $c=\nu d$ を用いた．この定数は実際弾性体の性質を反映するものであり，物理的には次のように定義する．長さ L の原子の鎖を ε の割合だけ引き伸ばす．すなわち，新しい長さを $L(1+\varepsilon)$ とする（ここでは静的な延伸を考えているのであり，振動は考えない）．各原子対の間隔は d から $d(1+\varepsilon)$ となる．よって，隣接する原子の変位の差は

$$q_{j+1}-q_j=\varepsilon d\sqrt{m} \tag{8-101}$$

となる．(8-66)を用いると，延伸により鎖に加えられたポテンシャルエネルギーは

$$V=\frac{\nu^2}{2}\varepsilon^2 d^2 mN=\frac{\rho c^2}{2}\varepsilon^2 L \tag{8-102}$$

である．よって鎖を延ばすのに必要な力は ε の小さい極限で

$$\frac{dV}{d(\varepsilon L)}=\rho c^2\varepsilon \tag{8-103}$$

である．この最後の式は鎖の応力を与える．ひずみ（単位長さ当たりの伸び）はもちろん ε である．よって

$$\frac{\text{応力}}{\text{ひずみ}}=\rho c^2=\text{弾性定数}. \tag{8-104}$$

(8-98) と (8-100) を結び付けると，ラグランジアンが次のようになる．

$$L=\frac{\rho}{2}\int dx\ \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)^2-\frac{\rho c^2}{2}\int dx\ \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 \tag{8-105}$$

考えている基本モードは e^{ikx} という形をしており，基準座標は $U(k,t)$ である．このラグランジアンが基準座標を用いると次のように表されることは，読者に明らかであろう．

$$L=\frac{\rho}{2}\int\frac{dk}{2\pi}\left[\frac{\partial U(k,t)}{\partial t}\right]^2-\frac{\rho c^2}{2}\int\frac{dk}{2\pi}k^2 U(k,t)^2 \tag{8-106}$$

このラグランジアンで表される系は調和振動子の集まりであると考えることができ，k のそれぞれの値に 1 つの振動子が対応する．ここでの連続体近似では，k は連続変数で無限個の値をとる．ここで離散的原子の描像をふたたび導入してみると，

dk についての積分は実際には k の離散的値についての和である．離散的な k の値の間隔は $2\pi/L$（L は鎖の長さ）であり，k の値の数は鎖の原子の数と等しい．

作用積分 $\int_0^T L dt$ の極値を求めることにより，連続変数を使って運動方程式を表すことができる．(8-105) に与えられている L を使うと，運動方程式は

$$\rho\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}=\rho c^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{8-107}$$

となる．(8-99) に示した議論の線に沿って，この運動方程式が以前に求めた運動方程式（8-68）と似ていることがわかる．方程式（8-107）は（8-71）と類似の解

$$u=e^{-i\omega t}a(x) \tag{8-108}$$

をもつ．$a(x)$ については（8-70）と同様の式

$$-\omega^2 a=c^2\frac{d^2 a}{dx^2} \tag{8-109}$$

が得られ，その解は

$$a(x)=e^{ikx} \tag{8-110}$$

となる．

(8-109) と（8-110）とを結び付けると，$\omega=kc$ であることがわかる．これは（8-90）と類似していて，実際 k の小さい極限では（8-90）はこの関係式になる．

(8-110) で与えられる a の値によって (8-108) で記述される u の運動は速度 c で動く進行波の運動である．すなわち，c は原子の鎖に沿っての音速である．実際の現実の系では分散があり，ω は k に比例しない．(8-90) に示したように，原子間隔と同程度の波長について，この分散は重要となる．

8-6　原子鎖の量子力学

原子鎖の運動はモードの運動によって記述される．それぞれのモードは調和振動子である．どの特定のモードのエネルギー状態もそのモードの量子数で決まる．それぞれのモードは波数 k と振動数 ω で特徴づけられる．振動数 ω のモードは $\hbar\omega/2$，$3\hbar\omega/2$，$5\hbar\omega/2$，…というエネルギー値をもつことができる．基底状態のエネルギーから数えると 0，$\hbar\omega$，$2\hbar\omega$，…というエネルギーである．これらの場合について，波数 k (振動数 ω) のフォノンが 0 個，1 個，2 個，…ある，という言い方をする．

いくつかの異なるモードを同時に励起することが可能である．たとえば，(1)波数

k_1 のモードを基底状態の上の第一の準位に励起すること，(2)波数 k_2 のモードを第１の準位に励起すること，(3)波数 k_3 のモードを基底状態の上の２番目の準位に励起することが可能であるとしよう．このとき結合した系の状態は基底状態から上に $\hbar(\omega_1+\omega_2+2\omega_3)$ の全エネルギーをもつ．波数 k_1 のフォノンが１個，波数 k_2 のフォノンが１個，波数 k_3 のフォノンが２個，合計４個のフォノンがあるという言い方もできる．

全体の系の基底状態は

$$E_g=\sum_k \frac{\hbar\omega_k}{2} \tag{8-111}$$

のエネルギーをもつ．

連続体の近似を用い，$\omega=kc$ とおくと，これは

$$E_g=\frac{L}{2\pi}\int_0^{k_{\max}} dk\ \frac{\hbar kc}{2} \tag{8-112}$$

となる．k についての 積分の上限 $k_{\max}$ が無限大となるならば，この積分は発散する．しかしながら，この式の中で用いた形 $\omega=kc$ は長波長（k が小さい）でのみ正しい．

ω についての正しい式を用いて，k についての積分の上限を適当な値にとるならば，基底状態のエネルギーをもっと正確に決めることができる．よって，ω_k について（8-90）を用いると，基底状態のエネルギーを

$$E_g=\sum_{k=-k_{\max}}^{k=k_{\max}} \frac{\hbar}{2}\nu \left| \sin\frac{kd}{2} \right| \tag{8-113}$$

と表すことができる．ここで

$$k_{\max}=\frac{2\pi}{d} \tag{8-114}$$

である．これを次のように書き換えることができる．

$$\sum_{n=-N/2}^{n=N/2} \hbar\nu\left|\sin\frac{\pi n}{N}\right|=2\hbar\nu\,\mathrm{Im}\left(\sum_{n=0}^{N/2} e^{i\pi n/N}\right) \tag{8-115}$$

N が非常に大きい場合，この結果は次のように近似される．

$$E_g=2\hbar cL\frac{1}{\pi d^2} \tag{8-116}$$

この結果によれば，エネルギーは鎖の長さに比例するが，間隔 d が０に近づくときエネルギーは発散することになる．すなわち，連続媒質では基底状態のエネルギーは無限大となる．もちろん，現実の物質ではエネルギーは有限である．

全エネルギーの代わりに基底状態の上の剰余エネルギーを測定するのが大変便利である．これについては2つの理由がある．(1)実際，基底状態のエネルギーは知られていないし，物理の問題として興味あることはない．たとえば，真の基底状態のエネルギーは原子に付いている電子のエネルギーのすべても含む．(2)長波長の励起のみを扱う場合は，連続体の近似は大変有用であり，励起エネルギーに対してよい近似を与える．しかしながら，この近似は基底状態について正しくない結果を与える．なぜなら，間隔 d を無視するからである(d を0とする)．よって，連続体の近似を使うときには，基底状態のエネルギーを求める必要のある問題を避けなければならない．

8-7　3次元結晶

これまで考察してきた1次元の例と現実的な3次元結晶との間に原理的な相違はない．しかしながら，さまざまなモードの振動数を詳細に求めるのはもっと困難である．モードは波数 $\mathbf{k}$ によって表されるが，この波数は k_x，k_y，k_z という成分をもつベクトルである．これらの成分で振動数を表したものは非常に複雑である．$\mathbf{k}$ のそれぞれの値に対して2つ以上のモードが存在しうる．さまざまな偏極(振動の方向)が可能だからである．さらに，現実の結晶では等間隔に原子が並んでいる場合だけでなく，単位胞が並んでいて単位胞の中で一群の原子が特徴的な原子配列をしていることがしばしばである．単位胞の中にいくつかの（たとえば p 個の）原子があるならば，$\mathbf{k}$ の各々の値に対して $3p$ 個の振動数がある．

3次元の結晶においても連続体近似は有効である．この近似では実際の結晶の格子構造は連続体の諸性質の非等方性（たとえば，非等方的圧縮率）として現れる．格子の対称性は弾性定数の対称性に現れる．さらに，基本モードの振動の方向は必ずしも波の伝わる方向に対して平行あるいは垂直とは限らない．

ここでの議論では，すべての方向について弾性定数が同じであるような物質を扱うことにする（一般には，立方体結晶のように対称的な場合でも，この性質をもつ必然性はない）．このとき，波動は縦波と横波の2種類ある．これら2つの波動は異なる速度をもち，縦波に対しては c_L と表し，横波に対しては c_T と表す．それぞれの $\mathbf{k}$ に対して，3つのモードがある．1つは振動数 $\omega_L = c_L k$（k は $\mathbf{k}$ の絶対値）をもつ．仮定より，異方性の効果はないのだから，振動数は波数の絶対値のみの関数であり，その特定の成分にはよらない．横波のモード（すなわち，原子変位の方向

が波動の伝播方向に垂直であるモード）は２つあり，ともに振動数は $\omega_T=c_Tk$ である．

それぞれの分離したモード（偏極の方向が異なるものも分離したモードとする）は独立の振動子として振る舞う．

体積 V の結晶を扱うことにする．k 空間において点 $\mathbf{k}$ を中心とする体積要素 $d^3\mathbf{k}=dk_xdk_ydk_z$ の中に波数をもつモードの数を計算しよう．結晶は直方体で辺の長さは L_x，L_y，L_z であるとする．１次元の例から得られた結果を用いると，k_x の離散的値の間隔は $2\pi/L_x$ である．よって，長さ dk_x の間には，k_x の離散的値が $dk_xL_x/2\pi$ 個ある．同じ考察を他の方向にも適用すると，体積要素の中に含まれる $\mathbf{k}$ の離散的値の数は

$$\frac{dk_xdk_ydk_z}{(2\pi)^3}L_xL_yL_z=\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}V \tag{8-117}$$

である．この結果は大きな結晶の極限で任意の形状に対して得られる．

一般の場合にモードの振動数 $\omega_\mathbf{k}$ は $\mathbf{k}$ の非常に複雑な関数で，またいくつかの分枝をもつ（同じ $\mathbf{k}$ に対して異なる ω がある）．しかしそれを求めることは古典物理学の問題である．基本モードを記述する基準座標がわかるとその振動の形がわかる．よって量子力学の問題は振動子の簡単な系を解くことになり，系のすべての性質は容易に求められる．各々のモードの励起をフォノン励起と呼ぶ．

非常に簡単な特殊例として等方的な固体における縦振動のモード（すなわち，音波，特に縦波の音波）を考える．１次元の例のように，離散的に原子が並んでいる結晶を考え，後に長波長の極限（連続体近似）を取る．

完全解を見ると，分散の効果，複雑な分枝の効果，横波の効果などがすべてわかることになる．これは非常におもしろい研究課題である．しかしながら，連続体近似における量子力学の形を求めるのに，これらすべての段階を踏む必要はない．古典物理学の結果を直接使うことができる．離散的に並んでいる質点から出発し，長波長極限をとることは，古典物理学におけると同様に量子力学においても有用でありまた正しい．ポテンシャルが変位の２次関数によって適切に表現されるという制限さえ加えておけば，ラグランジアンは同じ形である．古典的方法と量子力学的方法の結果の間にある類似性の理由は，計算の手続きが線形変換だけからなるということである．たとえば，基準座標に変換してのちに，連続体近似などの近似を行うのであり，このような変換や近似は古典物理学においてと全く同様に量子力学にお

いても行うことができる．

古典物理学から導かれる方程式は以下のようである．平衡位置が $\mathbf{r}$ である粒子の変位を $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ とする．長波長領域を考え，連続体近似が有効であるとする．平面波モードを使うと，次のような Fourier 変換で系を記述するのが容易になる．

$$\mathbf{U}(\mathbf{k}, t)=\int_v d^3\mathbf{r}\ \ \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{8-118}$$

ここで $\mathbf{r}$ は空間的ベクトルでその成分は x，y，z である．さまざまなモードの基準座標は $\mathbf{U}$ の方向と $\mathbf{k}$ の方向との間の関係に依存する．すなわち，ベクトル $\mathbf{U}$ の座標 $\mathbf{U}_x(\mathbf{k}, t)$ は必ずしも基準モードを表さない．等方的な物質では，ある与えられた $\mathbf{k}$ の 3 つのモードは次のような基準座標をもつ．

$$U_1(\mathbf{k}, t)=\frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{U}}{k} \tag{8-119}$$

（すなわち，k の方向に沿った U の成分）および

$$U_2(\mathbf{k}, t)=\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{U} \tag{8-120}$$

$$U_3(\mathbf{k}, t)=\mathbf{e}_2\cdot\mathbf{U} \tag{8-121}$$

ここで $\mathbf{e}_1$ と $\mathbf{e}_2$ は $\mathbf{k}$ に垂直な 2 つのベクトルで互いに垂直である．以下では，(8-119) で与えられる縦振動モードによる運動エネルギーとポテンシャルエネルギーに限定することにし，横振動を省略する．

古典物理学の結果を用いると，縦振動モードに対するラグランジアンは次のように書かれる．

$$L=\frac{\rho}{2}\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\left\{\left[\frac{\partial U_1(\mathbf{k}, t)}{\partial t}\right]^2-c^2k^2[U_1(\mathbf{k}, t)]^2\right\} \tag{8-122}$$

ここで音速 $c=\omega/k$ を導入した．これは伝播方向の関数である．これは 1 次元の例を直接的に一般化したものである．もとの変数 $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ でラグランジアンを表すと，

$$L=\frac{\rho}{2}\int d^3\mathbf{r}\ \left[\left|\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t}\right|^2-c^2(\nabla\cdot\mathbf{u})^2\right] \tag{8-123}$$

となる．この式の右辺の第 1 項は運動エネルギーで質量の 1/2 に速度の 2 乗を掛けたものである．第 2 項は圧縮のエネルギーであり，圧縮のひずみ $\nabla\cdot\mathbf{u}$ によって与えられる．横振動の弾性波を無視しているので，ずれのひずみのエネルギーは含まれない．

$\mathbf{u}$ についての変分をとると古典的運動方程式が得られる．

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\mathbf{u}}{\partial t^2}=\nabla(\nabla\cdot\mathbf{u}) \tag{8-124}$$

圧縮ひずみ関数を $\mathbf{u}$ の発散で定義する．

$$\phi = \nabla \cdot \mathbf{u} \tag{8-125}$$

このとき

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = \nabla^2 \phi \tag{8-126}$$

が得られるが，これは古典的波動方程式である．

核 $\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ を用いて (8-124) の Fourier 変換を行い，$\mathbf{k}$ に平行な成分をとりだすと，

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 U_1}{\partial t^2} = -k^2 U_1 \tag{8-127}$$

が得られる．これは，1個の調和振動子の方程式であり，このことから，$U_1(\mathbf{k}, t)$ が実際に基準座標であることがわかる．

(8-123) のラグランジアンから量子力学的な結果は容易に得られる．求めるモードのエネルギー準位は基底状態から $n\hbar(kc)$ のところにある．固定した初期状態 $\mathbf{u}(\mathbf{r}, 0)$ から終状態 $\mathbf{u}(\mathbf{r}, T)$ に到る振幅を求めよう．それは，

$$K[\mathbf{u}(\mathbf{r}, T), T\,;\,\mathbf{u}(\mathbf{r}, 0), 0]$$
$$= \int \mathscr{D}^3\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \exp\left\{\frac{i\rho}{2\hbar}\int_0^T dt \int_0^{L_x} dx \int_0^{L_y} dy \int_0^{L_z} dz \left[\left|\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}\right|^2 - c^2(\nabla\cdot\mathbf{u})^2\right]\right\} \tag{8-128}$$

である．(8-128) の経路積分はベクトル $\mathbf{r}$ の3つのすべての成分と時間 t によって定義されたすべての経路 $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ について行う．もちろん，関数 $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ が初めと終わりにおいて与えられた形をとるという条件に従う．これは本来の経路積分の考えを拡張したもので興味深い．これまでは被積分関数は1変数 t の1つの関数 $x(t)$ あるいは複数の関数の汎関数であった．そしてそれらすべての経路，すなわち，関数について積分したのである．ここでは，4つの変数 x，y，z，t の関数 $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ の汎関数積分を行い，この関数のすべての値について経路積分を実行しなければならない．前に述べた通常の技巧によりこの積分を実行することができる．なぜなら，被積分関数はガウス型の汎関数だからである．

経路積分を求める第1段階は指数部分に現れる積分の停留値を与える経路を見つけることである．すなわち，(8-124)，あるいはもっと便利なのは，(8-126)で与えられる波動方程式を満たすものである．時刻 $t=0$，$t=T$ においては決められた境界条件を課さなければならない．この境界条件を満足させることはむずかしい問題ではない．しかしながら，これは古典物理学における通常の問題とやや異なる．古

典物理学の問題では時刻 t において座標とその微分すなわち $\mathbf{u}(\mathbf{r},0)$ と $(\partial\mathbf{u}/\partial t)_{t=0}$ を与えるのが普通である．

上記の方針に従って問題を解くことができる．しかしながら，前の例で学んだことは，経路積分を実行する前に基準座標に変換しておくほうがずっと容易であるということである．そのような変換をすると

$$K=\int_{U_1(0)}^{U_1(T)}\mathscr{D}\,U_1(\mathbf{k},t)\exp\left[\frac{i\rho}{2\hbar}\sum_{\mathbf{k}}\int_0^T dt\ (\dot{U}_1^2-k^2c^2U_1^2)\right] \tag{8-129}$$

が得られる．ここで境界値は次のように与えられる．

$$\begin{aligned} U_1(T)&=U_1(\mathbf{k},T)=\frac{\mathbf{k}}{k}\cdot\int d^3\mathbf{r}\ \ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\mathbf{u}(\mathbf{r},T)\\ U_1(0)&=U_1(\mathbf{k},0)=\frac{\mathbf{k}}{k}\cdot\int d^3\mathbf{r}\ \ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\mathbf{u}(\mathbf{r},0)\end{aligned} \tag{8-130}$$

これも経路積分の単純なタイプで，経路がただ 1 つの変数 t によって記述されるものである．この経路積分は個々の基準モードの運動を表す経路積分の積で表されるので，問題がすでに解けていることがわかる．結果は次のとおりである．

$$\begin{aligned} K=\prod_{\mathbf{k}}\left(\frac{\rho kc}{2\pi i\hbar\sin kcT}\right)^{1/2}\exp\biggl(\frac{i\rho kc}{2\hbar\sin kcT}\Bigl\{&[U_1^2(\mathbf{k},T)+U_1^2(\mathbf{k},0)]\\ &\times\cos kcT-2U_1(\mathbf{k},T)U_1(\mathbf{k},0)\Bigr\}\biggr)\end{aligned} \tag{8-131}$$

$\mathbf{k}$ の成分についての積において，たとえば，x 成分は $2\pi n_x/L$ という値をとり，n_x は 0 から $N=L_x/d$ までの整数値をとる．ここで，d は原子間の間隔であり，考えている固体の辺の長さは L_x，L_y，L_z であるとする．もちろん，連続体の近似は原子間の距離が 0 ということであり，このとき積は無限となる．しかしながら，そのような問題は考えないことにし，初期座標と終座標に依存する項の形に注目することにする．よって (8-131) の指数項の前に掛かる根号の因子を無視すると，この式を近似的に次のように書くことができる．

$$\begin{aligned} K\sim\exp\biggl[\frac{i}{2\hbar}\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\ kc\Bigl\{&[U_1^2(\mathbf{k},T)+U_1^2(\mathbf{k},0)]\cos kcT\\ &-2U_1(\mathbf{k},T)U_1(\mathbf{k},0)\Bigr\}\frac{1}{\sin kcT}\biggr]\end{aligned} \tag{8-132}$$

境界値 $U_1(\mathbf{k},0)$，$U_1(\mathbf{k},T)$ に対する振幅の依存性はこの最後の結果に含まれている．任意にこれらの関数を選んでも［それらは (8-130) に示されているように $\mathbf{u}(\mathbf{r},0)$ と $\mathbf{u}(\mathbf{r},T)$ に依存する］，(8-132)の積分を形式的に実行することができて最

終的な結果が得られる．このようにして系の量子力学的挙動についてのすべての問いには少なくとも原理的に答えることができる．

8-8 量子的場の理論

u(**r**, t) のような連続関数で記述される波動やモードを考える．この連続関数には原子的な微細構造は現れないものとする．すなわち，波長が十分長いのでそのような微細構造は無視できるものとする．この場合，**u**(**r**, t) は場（すなわち，空間の各点の関数）であるという．前節で考察した例においては，場は音波の変位場である．この意味で，**u**(**r**, t) の運動方程式は場の方程式とも呼ばれる．この章では線形の場の方程式のみを扱ってきた．また前述のラグランジアンは場に対するラグランジアンと呼ぶこともできる．基準座標 **U**(**k**, t) は場の基準モードの座標である．これらのモードを量子的振動子として記述することを**場の量子化**という．その結果の理論を量子的場の理論と呼び，方程式の古典論的解析と区別する．

前に見たように，量子的場の理論におけるほとんどすべての努力は基準モードを見つけるために古典的運動方程式を解くことに向けられており，これは完全に古典物理学の領域に属する．よって「量子化」というのは単にそれぞれの基準モードが量子的振動子であり，エネルギー準位 $\hbar\omega(n+1/2)$ をもつというだけである．このように表現すると，量子的場の理論というのは Schrödinger 方程式の特殊な帰結であって，それ以上の何物でもないということになる．

場の変数（音波の変位や圧力など）が究極的に基本的な力学変数の組み合わせで定義される場合はいつでもこのことは正しいのである．これらの基本的変数とは，場の性質をもつ物質を構成する粒子，原子，電子，核の位置を記述するものである．たとえば，音波の場合，結晶中の構成部分すなわち原子の運動が Schrödinger 方程式によって記述されると仮定する．これより，長波長の音波が古典的線形方程式に従うことが導かれ，さらにモードが量子化されることがわかる．

Schrödinger 方程式から量子力学的に導出されていなくても，系に特有の場の古典的方程式が知られている場合がある．たとえば，核物質の粒滴の振動を記述する方程式は古典論との類推から予想された*)．このような場合，量子力学的導出が完全になされたときに場のモードが量子的振動子となると予想することは正しい．実際，

*) M.S. Plesset, On the Classical Model of Nuclear Fission, *Am. J. Phys.* **9** (1941), 1-10.

このような例はあまり多くはなく，むしろほとんどすべての場合について量子力学的導出が行われている．

上に述べたものと基本的に異なるタイプの場の方程式が量子力学に存在する．このタイプの例として，Maxwell の電磁場の方程式がある．これは場の線形連立方程式である．これらの連立方程式から，音波に対して導いたものと類似の波動方程式が導かれる．偏極条件だけが異なる．パイプオルガンが定在波，すなわちモードをもつように，空洞中の電磁波も振動の基本モードによって古典的に記述される．これらの振動も量子化されて，それぞれのモードが基底状態の上に $\hbar\omega n$ のエネルギー準位をもつと推論することは自然である．これは電磁場の量子論の基本的仮定であるが，物質に対する Schrödinger 方程式から厳密に導かれるというものではない．なぜなら，電磁場を原子的媒質の長波長近似と考えることができないからである．今日では，特にエーテルのような媒質を考えないで，Maxwell 方程式そのものを認めることにしている．電磁場も，上に述べたような単純で直接的な方法によって量子化されるものと仮定するのである．この例については，もっと詳細に第 9 章で議論する．

電磁場の量子化の仮定はこれまで行われてきた実験のすべてと矛盾がないが，理論的な困難がいくつかある．これらの困難は非常に短波長のモードに拡張することに関係している．積分を波長 0 のところまで行おうとすると，積分の発散を生じてしまう効果である．これに対応する困難は結晶振動の場合には実際生じない．なぜなら，波長が原子間隔と同程度の非常に短波長の領域まで解析をしようとすれば，連続体近似を止めなければならないからである．結晶の場合には有限の体積には有限の数のモードしか存在しない．一方，電磁気においては任意の体積中のモードの数は無限なのである．

場のいろいろなモードが励起されているとき，異なる場合には異なる名前をもつ「もの」が存在すると考えるのである．音波すなわち結晶振動に対して，励起を**フォノン**と呼ぶ．電磁場に対しては**フォトン**，中間子場に対しては**メソン**と呼ぶ．電子さえも場の励起として表現される．しかしこれは今まで議論してきたものとは大変に異なる種類の場である．これはフェルミ場と呼ばれる．粒子は排他律に従う．ラグランジアンは調和振動子の系として量子化されるのではなく違った方法で量子化される．調和振動子のモードとして量子化される場はボーズ粒子と呼ばれる．それらはボーズ統計あるいは対称統計に従う．その意味は，2 つの粒子があって 1 つは

波数 k_1 をもち他方は波数 k_2 をもつ場合，状態の数はただ 1 つであるということである．第一の粒子が k_2 をもち第二の粒子が k_1 をもっていても新しい状態ができたことにならないのである．なぜなら，この場について，波数 k_1 と k_2 のモードが第一準位に励起されているという 1 つの状態があるだけである．この状態は $\hbar\omega_1+\hbar\omega_2$ というエネルギーをもつ．粒子を交換したときどちらの励起がどちらか，というような問いは意味をもたない．次の章でこのことを電磁場のフォトンの場合にもっと詳しく議論する．

問題 8 - 7　スピン 0 の中性粒子（たとえば，中性のパイ中間子）は自由のときに次のラグランジアンで表される場 ϕ によって表現される．

$$L=\int d^3\mathbf{r}\ \frac{1}{2}\left[\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)^2-c^2|\nabla\phi|^2+\frac{\mu^2c^4}{\hbar^2}\phi^2\right] \tag{8-133}$$

ここで μ はある定数である．この場が波動 $\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ に対応する量子状態をもつことを示せ．ここで励起エネルギーは

$$\hbar\omega=\sqrt{\hbar^2k^2c^2+\mu^2c^4} \tag{8-134}$$

である．$\hbar\mathbf{k}=\mathbf{p}$ を励起状態の運動量とみなすと，エネルギーは

$$E=\sqrt{|\mathbf{p}|^2c^2+\mu^2c^4} \tag{8-135}$$

となる．これは運動量 $\mathbf{p}$ と質量 μ をもつ粒子のエネルギーに対する相対論的公式である．（p^2 が小さいとき近似的に

$$E=\mu c^2+\frac{p^2}{2\mu}+\cdots$$

となることに注意．これは静止エネルギー μc^2 と運動エネルギー $p^2/2\mu$ の和である．）

モード $\mathbf{k}_1$ が第二の量子準位に励起され，モード $\mathbf{k}_2$ が第一量子準位に励起されているという場の状態は，運動量 $\hbar\mathbf{k}_1$ の粒子を 2 個，運動量 $\hbar\mathbf{k}_2$ の粒子を 1 個含む系の状態を表すものと解釈される．このようにして，モードの励起準位と，粒子数とが対応する．基底状態というのは粒子が存在しない状態と考えられるので，真空状態と呼ばれる．振動子場の励起と緩和は粒子の生成消滅に対応する．このようにして相対論的場の理論における諸過程が表現される．

8-9　強制調和振動子

この章では単純な振動子あるいは振動子の集まりに還元できる系を扱ってきた．そして振動子は自由であるとし，他の何物とも相互作用しないものとしてきた．このような線形系が他の系と相互作用をしたり外力によって駆動されている場合を扱おうとすると，解析をさらに進める必要がある．このような系の例としては，変動する外場の中の多原子分子，衝突する多原子分子，結晶中で電子が動いて振動モードを励起する場合，外場とモードとの他の相互作用などがある．われわれは，相互作用の問題を一般的に議論することをしないで，原子系と電荷が電磁場と相互作用する場合を例として扱う．これを次の章で行う．他の場合は直接的な類似性によって解析できる．

この問題は 2 つの面をもっている．(1)場を独立な振動子の成分に分解すること；(2)それぞれの振動子と外場ポテンシャルや他の系との相互作用を記述すること．振動子に分解することは，今までこの章で徹底的に調べられた．

このような問題に対する完全な方法論を準備するためには，外場ポテンシャルによって攪乱される 1 個の振動子の振る舞いを解析すれば十分である．以上のことを次の章でまとめて議論する．

この節では 1 個の調和振動子の研究に逆戻りするが，ある外場ポテンシャルや攪乱と線形に結合している場合を考える．このような系のラグランジアンは次のように与えられる．

$$L=\frac{M}{2}\dot{x}^2-\frac{M\omega^2}{2}x^2-\gamma(t)x \tag{8-136}$$

ここで $-\gamma(t)$ は外力である．便宜上外力は $t=0$ から $t=T$ までの間だけ働いていて，初め（$t=0$）と終わり（$t=T$）で振動子は自由であるものとする．この問題はすでに問題 3-11で完全に解いた．そして振動子が $t=0$ で点 x_a から出発し $t=T$ で x_b に到る振幅 $K(b,a)$ が得られている．しかしここでの応用としては初めに状態 n にあった振動子が時刻 T に状態 m に見出される振幅 G_{mn} を求めると便利である．この表現はしばしば座標表示よりも便利である．

8-1節で自由な調和振動子の波動関数 ϕ_n を求めた．また問題3-11で強制調和振動子の運動を記述する核を求めた．これより

$$G_{mn}=e^{iE_mT/\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dx_b\int_{-\infty}^{\infty}dx_a\ \phi_m(x_b)K(x_b,T;x_a,0)\phi_n(x_a) \tag{8-137}$$

に直接代入することにより振幅 G_{mn} を求めることができることがわかる.

$m=n=0$ の場合, この積分は評価するのにやや長くかかるガウス型であるが, 特に問題はない. 結果は次のようになる.

$$G_{00}=\exp\left[-\frac{1}{2M\omega\hbar}\int_0^T dt\int_0^t ds\ \gamma(t)\gamma(s)e^{-i\omega(t-s)}\right] \tag{8-138}$$

m と n が 0 と等しくない場合は, 積分はもっと複雑になる. しかしながら, 問題8-1で用いたのと同じ技巧を用いることができる. 強制調和振動子が状態 f から状態 g になる振幅を求める. ここで 2 つの状態 f, g は問題8-1で定義されている. この振幅は

$$\begin{aligned}F(b,a)&=\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}G_{mn}f_m^*(b)f_n(a)e^{-iE_mT/\hbar}\\&=\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}G_{mn}\left\{\exp\left[-\frac{M\omega}{4\hbar}(a^2+b^2)\right]\right\}\\&\quad\times\frac{a^nb^m}{\sqrt{m!\,n!}}\left(\frac{M\omega}{2\hbar}\right)^{(m+n)/2}e^{-i\omega T/2}\end{aligned} \tag{8-139}$$

である. ここで M は粒子の質量である. [(8-28) を見よ.] $F(b,a)$ を求めることができれば, F に $\exp[(M\omega/4\hbar)(a^2+b^2)]$ を掛けその結果の式を a と b についてべき級数展開することにより G_{mn} を求めることができる. すなわち, 最初に次の積分を求める.

$$F(b,a)=\sqrt{\frac{M\omega}{\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}dx_2\int_{-\infty}^{\infty}dx_1\ e^{-(M\omega/2\hbar)(x_2-b)^2}K(x_2,T;x_1,0)e^{-(M\omega/2\hbar)(x_1-a)^2} \tag{8-140}$$

ここで $K(x_2,T;x_1,0)$ は強制調和振動子に対する核である [式 (3-66)]. この被積分関数の指数部分には変数が 2 次形式でのみ現れているから, 積分は容易に実行できる. 結果の代数計算は厄介なものもあるが, とにかく次の式が得られる.

$$\begin{aligned}F(b,a)=\Big\{\exp\Big[&-\frac{M\omega}{4\hbar}(a^2+b^2-2abe^{-i\omega T})+i\sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}}(a\beta+b\beta^*e^{-i\omega T})\\&-\frac{1}{2M\omega\hbar}\int_0^T dt\int_0^t ds\ \gamma(t)\gamma(s)e^{-i\omega(t-s)}\Big]\Big\}e^{-i\omega T/2}\end{aligned} \tag{8-141}$$

ここで

$$\beta=\frac{1}{M\sqrt{2\omega}}\int_0^T dt\ \gamma(t)e^{-i\omega t} \tag{8-142}$$

$$\beta^*=\frac{1}{M\sqrt{2\omega}}\int_0^T dt\ \gamma(t)e^{i\omega t} \tag{8-143}$$

G_{00}の値は (8-141) で $a=b=0$ とおくことにより容易に得られる．結果は (8-138) と同じである．次に前に述べたように指数関数を掛け，

$$x=\sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}}a,\quad y=\sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}}be^{-i\omega T}$$

とおくことにより，

$$\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}G_{mn}\frac{x^n y^m}{\sqrt{n!m!}}=G_{00}\exp(xy+i\beta x+i\beta^* y) \tag{8-144}$$

を得る．右辺を x と y のべき級数で展開することにより次の最終結果が得られる．

$$G_{mn}=\frac{G_{00}}{\sqrt{m!n!}}\sum_{r=0}^{l}\frac{m!}{(m-r)!r!}\frac{n!}{(n-r)!r!}r!(i\beta)^{n-r}(i\beta^*)^{m-r} \tag{8-145}$$

ここで l としては m と n のうちの小さいほうをとる．

これで強制調和振動子の問題は完全に解けた．次の章でさらにこれを議論し用いる．

第 9 章　量子電気力学

この章では荷電粒子と電磁場との相互作用を議論する．このような相互作用の例を7-6節で見た．そこでは電磁場の変数はラグランジアンのポテンシャル項に入っている．その節で導入された電磁場の項はベクトルポテンシャル **A** である．7-6節は特定の与えられた場の中での運動を扱った．場 **A** がどのようにして生まれたのか，または運動する粒子によって場がどのように影響されるかについてなにも述べていない．すなわち，この定式化は，場の動力学についての解析をなにも含んでいない．与えられたポテンシャルを用いるこのような方法は近似にすぎない．ポテンシャルが十分大きな装置によって生じるもので粒子の運動がポテンシャルに影響を与えない場合にこの近似は有効である．

この章では，ポテンシャルが粒子の運動に及ぼす影響だけでなく，粒子がポテンシャルに及ぼす影響についても考える．まず，古典論から出発し，電磁場の動力学を記述するのに Maxwell 方程式を用いる．これらの方程式では，存在する物質の電荷密度と電流によって場を表現する．

今まで古典論の法則が最小作用の原理で表現されれば，古典系に対応する量子力学的法則を求めるのが容易であることを見てきた．ある変数 q の変分に対する作用 S の極値が古典的運動方程式に対応するならば，量子力学的法則は次のように表されることがわかった．すなわち，作用 S に対応する系の発展の量子力学的振幅は，その発展条件に合う変数 q のあらゆる可能な経路について $e^{iS/\hbar}$ を経路積分したものである．

Maxwell 方程式で表現される古典電磁気学を最小作用の原理で表すことができることがわれわれの方法にとって重要である．ベクトルポテンシャル **A** とスカラーポテンシャル ϕ で表される作用 S は存在する．場の変数 $\phi(\mathbf{r},\ t)$ と $\mathbf{A}(\mathbf{r},\ t)$ を変化させてこの作用の極値を決めることにより，Maxwell 方程式に等価な電気力学を定式化する．したがって量子電気力学は，ある事象の振幅が

$$K(2,1)=\int_1^2 \mathscr{D}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\mathscr{D}\phi(\mathbf{r},t)\ e^{(\frac{i}{\hbar})S[\mathbf{A},\phi]} \tag{9-1}$$

であるという規則によって導かれる．ここで経路積分は，事象の初期状態と終状態の境界条件に従って，時空の各点における $\mathbf{A}$ と ϕ のあらゆる値について行う．

9-1　古典電磁気学

Maxwell 方程式　通常の古典論の基礎方程式すなわち Maxwell 方程式から出発して電磁気学を調べよう．透磁率と誘電率は自由空間におけるのと同じ値であると仮定する．$\mathbf{E}$ を電場ベクトル，$\mathbf{B}$ を磁束密度ベクトル，c を光速，$\mathbf{j}$ を電流密度，ρ を電荷密度とすると，Maxwell 方程式は

$$\nabla\cdot\mathbf{E}=4\pi\rho \tag{9-2}$$

$$\nabla\times\mathbf{B}=\frac{1}{c}\left(\frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t}+4\pi\mathbf{j}\right) \tag{9-3}$$

$$\nabla\cdot\mathbf{B}=0 \tag{9-4}$$

$$\nabla\times\mathbf{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t} \tag{9-5}$$

となる．電荷が保存するときのみ上の方程式は意味をもつ．すなわち，

$$\nabla\cdot\mathbf{j}=-\frac{\partial\rho}{\partial t}. \tag{9-6}$$

(9-4) は $\mathbf{B}$ があるベクトル $\mathbf{A}$ の回転（curl）であることを意味する．

$$\mathbf{B}=\nabla\times\mathbf{A} \tag{9-7}$$

この関係式は $\mathbf{A}$ を完全に決定しないので，$\mathbf{A}$ の発散を特定することができる．これを次のように選ぶ．

$$\nabla\cdot\mathbf{A}=0 \tag{9-8}$$

方程式系の相対論的 4 次元対称性を見かけ上保とうとする場合は，この選び方は望ましくない．[(9-8) を用いた結果が相対論的に不変でないというのではない．なぜなら，物理的結果は $\nabla\cdot\mathbf{A}$ という選択によらないからである．不変性がちょっと見ただけでは自明でないというだけである．] いずれにせよ，ここでは，非相対論的近似において問題を扱うことにする（なぜなら，Dirac 方程式に対する簡単な経路積分はない）．以下に量子化された電磁場の性質を示そうと思う．(9-8) を使うと結果はもっとも扱いやすくなる．

(9-7) と (9-8) を (9-5) に代入すると $\mathbf{E}+(1/c)\partial\mathbf{A}/\partial t$ の回転が 0 であることが

わかる．よってこれはあるポテンシャルの勾配でなければならない．

$$\mathbf{E}+\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}=-\nabla\phi \tag{9-9}$$

電荷も電流密度もない場合，方程式は容易に解ける．(9-2)，(9-8)，(9-9) より

$$\nabla\cdot\mathbf{E}=-\nabla^2\phi=4\pi\rho \tag{9-10}$$

であるが，$\rho=0$ ならば $\phi=0$，$\mathbf{E}=-(1/c)\partial\mathbf{A}/\partial t$ となる．(9-3) に $\mathbf{j}=0$ を入れると [$\nabla\times(\nabla\times\mathbf{A})=\nabla(\nabla\cdot\mathbf{A})-\nabla^2\mathbf{A}$ に注意]，

$$\nabla^2\mathbf{A}-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\mathbf{A}}{\partial t^2}=0\,. \tag{9-11}$$

よって $\mathbf{A}$ のそれぞれの成分は波動方程式を満たす．

A を進行平面波で展開する．

$$\mathbf{A}(\mathbf{R},t)=\mathbf{a}_{\mathbf{k}}(t)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \tag{9-12}$$

振幅 $\mathbf{a}_{\mathbf{k}}$ に対する方程式は $\ddot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}}=-c^2k^2\mathbf{a}_{\mathbf{k}}$ である．これより $\mathbf{a}_{\mathbf{k}}$ は $\mathbf{a}_{\mathbf{k}}$ の各成分の方向について振動数 $\omega=kc$ の単純な調和振動子であることがわかる．しかし，実際には，$\mathbf{a}_{\mathbf{k}}$ の $\mathbf{k}$ 方向の成分は 0 なので，2 つの独立な横波だけが存在する．これは (9-8) の意味することで次のように表される．

$$\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_{\mathbf{k}}=0 \tag{9-13}$$

よって自由空間内の場はそれぞれの $\mathbf{k}$ について 2 つの横波からなる自由調和振動子の集まりである．

問題 9 - 1　この平面波の解に対して $\mathbf{E}$，$\mathbf{B}$，$\mathbf{k}$ が相互に垂直であることを示せ．

電荷と電流密度があるときの解　ここで $\mathbf{A},\phi$ の解と電流電荷密度を平面波で展開する．

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}(\mathbf{R},t)&=\sqrt{4\pi}\,c\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\,\mathbf{a}_{\mathbf{k}}(t)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\\
\phi(\mathbf{R},t)&=\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\,\phi_{\mathbf{k}}(t)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\\
\mathbf{j}(\mathbf{R},t)&=\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\,\mathbf{j}_{\mathbf{k}}(t)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\\
\rho(\mathbf{R},t)&=\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\,\rho_{\mathbf{k}}(t)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}
\end{aligned} \tag{9-14}$$

問題 9-2　時刻 t に位置 $\mathbf{q}(t)$ に存在する1個の電荷 e に対応する電荷密度が次のように書ける理由を説明せよ．

$$\rho(x, y, z, t) = \mathrm{e}\delta[x-q_x(t)]\delta[y-q_y(t)]\delta[z-q_z(t)] = \mathrm{e}\delta^3[\mathbf{R}-\mathbf{q}(t)]$$

次を示せ．

$$\rho_{\mathbf{k}} = \mathrm{e}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}(t)} \tag{9-15}$$

電流密度は $\mathbf{j}(\mathbf{R}, t) = \mathrm{e}\dot{\mathbf{q}}(t)\delta^3[\mathbf{R}-\mathbf{q}(t)]$ である．$\mathbf{q}_i(t)$ に存在する電荷を e_i とするとき，$\rho_{\mathbf{k}}$ と $\mathbf{j}_{\mathbf{k}}$ の値は

$$\rho_{\mathbf{k}} = \sum_i \mathrm{e}_i e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}_i(t)} \qquad \mathbf{j}_{\mathbf{k}} = \sum_i \mathrm{e}_i \dot{\mathbf{q}}_i(t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}_i(t)} \tag{9-16}$$

となる．

ここでも (9-13) は成り立つので，これを用いていくつかの式を簡単にできる．$\mathbf{B}$ の展開の係数は $\mathbf{B}_{\mathbf{k}} = \sqrt{4\pi}\,ci(\mathbf{k}\times\mathbf{a}_{\mathbf{k}})$，$\mathbf{E}$ の展開係数は $\mathbf{E}_{\mathbf{k}} = -i\mathbf{k}\phi_{\mathbf{k}} - \sqrt{4\pi}\,\dot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}}$ である．$\nabla\cdot\mathbf{E}$ の展開係数は $i\mathbf{k}\cdot\mathbf{E}_{\mathbf{k}} = k^2\phi_{\mathbf{k}}$ である．よって

$$k^2\phi_{\mathbf{k}} = 4\pi\rho_{\mathbf{k}} \tag{9-17}$$

すなわち，$\phi_{\mathbf{k}} = 4\pi\rho_{\mathbf{k}}/k^2$ が得られる．関数 $\phi_{\mathbf{k}}$ は電荷密度 $\rho_{\mathbf{k}}$ によって完全に決まる．たとえば $\ddot{\phi}_{\mathbf{k}}$ を含むような微分方程式を解く必要はない．

問題 9-3　関係式 $\phi_{\mathbf{k}} = \dfrac{4\pi\rho_{\mathbf{k}}}{k^2}$ は，任意の時刻における $\phi_{\mathbf{k}}$ が，その瞬間における電荷分布による Coulomb ポテンシャルであることを意味することを示せ．したがって，たとえば ρ がその点から距離 r_i にある電荷によってできているならば，ポテンシャルは $\phi = \sum_i \mathrm{e}_i/r_i$ である．これはまさに (9-10) の内容である．

ここで (9-3) を解かなければならない．すなわち，

$$i\mathbf{k}\times\mathbf{B}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{c}\dot{\mathbf{E}}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{c}4\pi\mathbf{j}_{\mathbf{k}} \tag{9-18}$$

しかし $i\mathbf{k}\times\mathbf{B}_{\mathbf{k}} = -\sqrt{4\pi}\,c\mathbf{k}\times(\mathbf{k}\times\mathbf{a}_{\mathbf{k}}) = \sqrt{4\pi}\,ck^2\mathbf{a}_{\mathbf{k}}$ かつ $\dot{\mathbf{E}}_{\mathbf{k}} = -i\mathbf{k}\dot{\phi}_{\mathbf{k}} - \sqrt{4\pi}\,\ddot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}}$ であるから，(9-17) を用いて $\dot{\phi}_{\mathbf{k}} = \dfrac{4\pi\dot{\rho}_{\mathbf{k}}}{k^2}$ を代入すると，次の式が得られる．

$$\ddot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}} + k^2c^2\mathbf{a}_{\mathbf{k}} = \sqrt{4\pi}\left(\mathbf{j}_{\mathbf{k}} - \frac{i\mathbf{k}\dot{\rho}_{\mathbf{k}}}{k^2}\right) = \sqrt{4\pi}\,\mathbf{j}'_{\mathbf{k}} \tag{9-19}$$

ここで $\mathbf{j}'_{\mathbf{k}} = \mathbf{j}_{\mathbf{k}} - i\mathbf{k}\dot{\rho}_{\mathbf{k}}/k^2$ を $\mathbf{j}_{\mathbf{k}}$ の横成分と呼ぶ．(9-6) で表される電流の保存則は
$\dot{\rho}_{\mathbf{k}} = -i\mathbf{k}\cdot\mathbf{j}_{\mathbf{k}}$ となるから

$$\mathbf{j}_\mathbf{k}' = \mathbf{j}_\mathbf{k} - \frac{\mathbf{k}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{j}_\mathbf{k})}{k^2} \tag{9-20}$$

である．つまり $\mathbf{j}_\mathbf{k}'$ は $\mathbf{j}_\mathbf{k}$ から $\mathbf{k}$ 方向の成分を引いたものである．明らかに $\mathbf{k}\cdot\mathbf{j}_\mathbf{k}'$ である．

たしかに Maxwell 方程式を大変簡単な形に還元した．粒子間の瞬間的な Coulomb 相互作用を除けば各 $\mathbf{k}$ の値について 2 つの横波に対する方程式だけとなる．それぞれの横波は調和振動子でその振幅は対応する方向の電流の成分によって駆動されている．すなわち，$\mathbf{k}$ に垂直な 2 つの方向を 1，2 としてこれらの方向の $\mathbf{a}_\mathbf{k}$ の成分を $a_{1\mathbf{k}}$，$a_{2\mathbf{k}}$ とすると Maxwell 方程式は次のようになる．

$$\ddot{a}_{1\mathbf{k}} + k^2c^2a_{1\mathbf{k}} = \sqrt{4\pi}\, j_{1\mathbf{k}} \tag{9-21}$$

$$\ddot{a}_{2\mathbf{k}} + k^2c^2a_{2\mathbf{k}} = \sqrt{4\pi}\, j_{2\mathbf{k}} \tag{9-22}$$

ここで $j_{1\mathbf{k}}$ と $j_{2\mathbf{k}}$ はこれらの方向の $\mathbf{j}_\mathbf{k}$ の成分である（“$\mathbf{j}_\mathbf{k}'$”を使わなくてよいのはなぜか）．

最小作用の原理　量子電気力学*) の仮説は (9-21) と (9-22) で定義される振動子が量子的振動子であるということである．量子化を実行するために，場の運動方程式と場の中の粒子の運動方程式を与える最小作用の原理を見つけなければならない．作用は

$$S = S_1 + S_2 + S_3 \tag{9-23}$$

と表される．ここで

$$S_1 = \int dt \sum_i \frac{m_i}{2}|\dot{\mathbf{q}}_i|^2 \tag{9-24}$$

は場を無視したときのすべての粒子の作用積分である（粒子間に電気的でない力が働く場合はそれを S_1 に含める）．

$$S_2 = -\int dt \int d^3\mathbf{R} \left[\rho(\mathbf{R},t)\phi(\mathbf{R},t) - \frac{1}{c}\mathbf{j}(\mathbf{R},t)\cdot\mathbf{A}(\mathbf{R},t)\right] \tag{9-25}$$

は場と粒子の間の相互作用を表す作用積分である．

$$S_3 = \frac{1}{8\pi}\int dt \int d^3\mathbf{R}\ (E^2 - B^2) = \frac{1}{8\pi}\int dt \int d^3\mathbf{R} \left[\left|-\nabla\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}\right|^2 - |\nabla\times\mathbf{A}|^2\right] \tag{9-26}$$

*）電子・陽電子理論も含めたものを「量子電気力学」と呼ぶ物理学者もいる．この章ではそのような問題は扱わない．よって，われわれの扱う量子電気力学は電磁場に対する量子論である．

は場の作用積分である．変数は $\mathbf{A}(\mathbf{R},t)$，$\phi(\mathbf{R},t)$，$\mathbf{q}_i(t)$ である．

問題 9-4　2-1 節で作用 S の形から力学の運動方程式を導く機構を議論した．そこでは座標の変分 $\delta\mathbf{q}$ に対する条件 $\delta S=0$ の下に極値 S_{cl} を求めた．(9-23) で定義される作用 S から，$\mathbf{A}$ と ϕ の 1 次変分に対して $\delta S=0$ を課すことにより，Maxwell 方程式を導く方法を示せ．

変数 $\mathbf{a_k}$ を使うと運動方程式がもっとも簡単になるので，作用をこれらの変数で表してみることは価値がある．(9-14) に与えられている式を S_3 に代入すると

$$S_3=\frac{1}{2}\int dt\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\left(\left|\dot{\mathbf{a}}_\mathbf{k}+i\mathbf{k}\frac{\phi_\mathbf{k}}{\sqrt{4\pi}}\right|^2-c^2|\mathbf{k}\times\mathbf{a_k}|^2\right)$$
$$=\frac{1}{2}\int dt\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\left(|\dot{\phi}_\mathbf{k}|^2\frac{k^2}{4\pi}+\dot{\mathbf{a}}_\mathbf{k}^*\cdot\dot{\mathbf{a}}_\mathbf{k}-k^2c^2\dot{\mathbf{a}}_\mathbf{k}^*\cdot\mathbf{a_k}\right) \tag{9-27}$$

が得られ S_2 は

$$S_2=-\int dt\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\left(\rho_{-\mathbf{k}}\phi_\mathbf{k}-\sqrt{4\pi}\,\mathbf{j}_{-\mathbf{k}}\cdot\mathbf{a_k}\right) \tag{9-28}$$

となる．$\phi_\mathbf{k}=\dfrac{4\pi\rho_\mathbf{k}}{k^2}$ を代入して，S_2 と S_3 にある $\phi_\mathbf{k}$ の項を足し合わせると

$$S_c=\int dt\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\left(-\frac{4\pi\rho_\mathbf{k}\rho_{-\mathbf{k}}}{2k^2}\right)=\int dt\left[-\frac{1}{2}\sum_i\sum_j\frac{\mathrm{e}_i\mathrm{e}_j}{|\mathbf{q}_i-\mathbf{q}_j|}\right] \tag{9-29}$$

が得られる．ここで (9-16) ならびに $\displaystyle\int d^3\mathbf{k}\,\frac{4\pi}{k^2}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}=\frac{1}{R}$ を用いた．これはまさに電荷の間の Coulomb 相互作用であり，通常電磁場の放射効果を無視して原子状態を解析するときに考慮される．よってこの相互作用を物質の作用 S_{mat} の中に含めることにする．

$$S_{mat}=S_1+S_c=\int dt\sum_i\left(\frac{m}{2}\dot{q}_i^2-\frac{1}{2}\sum_i\frac{\mathrm{e}_i\mathrm{e}_j}{|\mathbf{q}_i-\mathbf{q}_j|}\right) \tag{9-30}$$

そして全体の作用を $S=S_{mat}+S_{int}+S_{rad}$ と表す．電磁場の作用 S_3 をこのように 2 つの部分に分けた．1 つは瞬間的な Coulomb 相互作用に寄与するものであり，残りを輻射場 S_{rad} と呼ぶことにする（輻射場は瞬間場に対する補正を表す．たとえば，全体の効果は遅れを伴うものであり，光の速さを超えて作用しないからである)．輻射場の作用は S_3 から $\phi_\mathbf{k}$ を含む項を引いたものである．すなわち，

$$S_{rad}=\frac{1}{2}\int dt\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\left(\dot{a}_{1\mathbf{k}}^*\dot{a}_{1\mathbf{k}}-k^2c^2a_{1\mathbf{k}}^*a_{1\mathbf{k}}+\dot{a}_{2\mathbf{k}}^*\dot{a}_{2\mathbf{k}}-k^2c^2a_{2\mathbf{k}}^*a_{2\mathbf{k}}\right) \tag{9-31}$$

である．これはちょうど輻射振動子の作用である．これらの振動子と粒子の間の相互作用の作用積分は

$$S_{int}=\sqrt{4\pi}\int dt\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\,(j_{1-\mathbf{k}}a_{1\mathbf{k}}+j_{2-\mathbf{k}}a_{2\mathbf{k}}) \tag{9-32}$$

である．明らかに，$a_{1\mathbf{k}}$ と $a_{2\mathbf{k}}$ についての S の全作用の変分から運動方程式（9-21）と（9-22）が得られる．

もっと具体的に書くと，相互作用の作用積分は

$$S_{int}=\sqrt{4\pi}\int dt\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\sum_j e_j(a_{1\mathbf{k}}\,\dot{q}_{1j}+a_{2\mathbf{k}}\,\dot{q}_{2j})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}_j(t)} \tag{9-33}$$

である．ここで q_{1j} と q_{2j} は $\mathbf{k}$ に垂直な方向への $\mathbf{q}_j$ の成分である．よって非相対論的力学と電気力学のすべての法則は次の命題にまとめられる．すなわち，(9-30)，(9-31)，(9-33)の和である S は変数 $\mathbf{q}_j(t)$, $a_{1\mathbf{k}}(t)$, $a_{2\mathbf{k}}(t)$ の経路の変分に対して停留値をとる．量子電気力学は $e^{iS/\hbar}$ をこれらの経路について積分したものである．これについては次節で述べる．

9-2　輻射場の量子力学

真空中の輻射場の量子力学を議論することから始めよう．何も物質がないのであるから，全作用は（9-31）で与えられるような輻射場の作用だけである．

$$S=S_{rad} \tag{9-34}$$

これは明らかに調和振動子の集まりの作用である．(9-31)のような式の例をすでに第8章で見た．第8章で議論したようにこれらを量子的振動子と考えることにより量子電気力学が導かれると仮定する．

われわれの系は進行波であり $\mathbf{k}$ のそれぞれの値に対して振動数 $\omega=kc$ の2つのモード（偏極1と2）がある．そのうちの1つのモード，たとえば，$a_{1\mathbf{k}}$ についてエネルギー準位は

$$E_{1\mathbf{k}}=\left(n_{1\mathbf{k}}+\frac{1}{2}\right)\hbar kc \tag{9-35}$$

である．ここで $n_{1\mathbf{k}}$ は任意の正の整数または0である．

$n_{1\mathbf{k}}=1$ の場合，偏極1で運動量 $\hbar\mathbf{k}$ のフォトンが1個あるという．一般に $n_{1\mathbf{k}}$ 個のフォトンがあるという．この種の1個のフォトンのエネルギーは $\hbar kc$ である．

問題 9-5　場の中の運動量は

$$\frac{1}{4\pi c}\int d(\text{体積})\,\mathbf{E}\times\mathbf{B}$$

で与えられる．物質がないところ（つまり $\phi_{\mathbf{k}}=0$）ではこれが

$$\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\,\mathbf{k}(\mathbf{a}_{\mathbf{k}}^*\cdot\dot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}})$$

となることを示せ．

後で，物質と輻射場との相互作用を考えるとき，物質がある瞬間にエネルギー $\hbar\omega$ のフォトンを吸収または放出することがわかる．もちろん，これは Planck のもともとの仮説と同じである．

振動子の状態 n を記述するのに，n 個の「粒子」すなわち「フォトン」が存在するという描像を用いることができるということは印象的でありまた驚くべきことでもある．もちろん，どのように考えてもエネルギー値は同じである．しかし，振動子の状態が粒子としてうまく記述できると結論する前に注意しなければならない微妙な点がある．たとえば，今 n_j のうち 2 つだけが 0 でないものとしよう．これを $n_a=1$, $n_b=1$ とおく．状態 a に 1 個のフォトンがあり状態 b にもう 1 つのフォトンがあるということでこの振動子の状態を表現しようとする．しかし一見したところ，このような言い方をすると，同じエネルギーをもつ状態が 2 つあることを意味するように思われる．なぜなら，初めのフォトンを状態 b におき 2 番目のフォトンを状態 a におくことが可能と考えられるからである．この矛盾を解くには，α 粒子の例を考えればよい．2 つの α 粒子があってそれぞれの座標を x，y とする．x 粒子は $f(x)$ で表される状態にあり，y 粒子は状態 $g(y)$ にあるものとする．よって系の波動関数は

$$\psi(x,y)=f(x)g(y) \tag{9-36}$$

という 2 変数 x, y の関数になると考えられる．しかし，もう 1 つの状態では y が状態 f にあり，x が状態 g にあって波動関数は

$$\psi(x,y)=g(x)f(y) \tag{9-37}$$

となって初めの状態と異なる．しかし α 粒子の場合のように 2 つの粒子が真に同一であるならば 2 つの状態は区別できない．第 1 章で述べたように，α 粒子の交換だけ異なる 2 つの場合に対する振幅は常に足しておくというのが，量子力学の規則であ

る (これは Schrödinger 方程式から導かれる規則ではない)．今の場合について許される唯一の波動関数は

$$\psi(x, y)=f(x)g(y)+g(x)f(y) \qquad (9\text{-}38)$$

である (適当に規格化する．f と g が正規直交系であれば，ψ の規格化因子は $1/\sqrt{2}$ である．$f=g$ でかつ規格化されていると ψ の規格化因子は 1/2 である)．一般に α 粒子や他の Bose 統計に従う粒子に対して $\psi(x, y)=\psi(y, x)$ である．このような粒子系に対しては，1 つの粒子が状態 f にあり，1 つの粒子が状態 g にあるという状態がただ 1 つだけある．

振動子の励起状態がフォトンの数を表していると考えるとき，フォトンは Bose 粒子であると考えても，すべての結果に矛盾はない．よって 1 つの状態 $n_a=1, n_b=1$ は，2 つのフォトンがあって 1 つは a にあり 1 つは b にあるという状況を表す．粒子の交換は新しい状態をつくらない．

平行スピンの電子や他の Fermi 粒子については，粒子が交換されたとき，振幅を引算しなければならない．

$$\psi(x, y)=f(x)g(y)-g(x)f(y) \qquad (9\text{-}39)$$

波動関数 $\psi(x, y)=-\psi(y, x)$ は Fermi 粒子については一般に反対称である．もちろん，これも 1 つの状態である．しかし Fermi 粒子の場合，2 つの粒子は同じ状態を占有することができない．$f=g$ を (9-39) に入れると，0 となる．2 つのフォトンは 2 つの α 粒子と同様に同じ状態を占有できる．フォトンについてこれは $n=2$ の振動子状態に対応する．

物質が存在する状況でも理想的な場合には，物質がない場合とほとんど同じくらいに簡単に扱えることがある．それは空洞共振器 (導波管) の場合で壁を完全導体として理想化する．古典的にはよく知られているように，電場のやや複雑な分布を伴う振動子モードが多数可能である．古典的作用は自由振動子の集まりに還元されるが，振動子の変数は，進行平面波の振幅ではなくさまざまなモードの振幅を表す．これらの振動子を量子的振動子として解析し，それぞれのモードにあるフォトンの数を問題とすることになる．

9-3 基底状態

真空のエネルギー　可能な最低のエネルギーをもつ電磁場の状態は基底状態あるいは真空状態と呼ばれ，どのモードにもフォトンがない状態である．よってそれぞれのモードのエネルギーは $\hbar\omega/2$ である．ここで ω はモードの振動数である．この基底状態のエネルギーをあらゆる可能なモードについて足し合わせてみよう．有限の箱の中でも，どんなに大きい振動数のモードも存在するから，この和は無限になる．これは量子電気力学が突き当たった困難の初めの兆候であった．

今の場合，真空状態について，問題は簡単に解決できる．エネルギーを異なる零点から測定してみるものとする．一定のエネルギーからは何も物理的効果はないから，われわれが行う実験の結果は，エネルギーの零点を任意にとっても影響されない．したがって，真空状態のエネルギーを零点とする．そうすると，電磁場の任意の状態の全エネルギーは

$$E=\sum_j n_j\hbar\omega_j \tag{9-40}$$

で与えられる．ここで，場のすべてのモード j について和をとる．

しかしながら，エネルギーの零点を完全に任意にとることができるというのは実際上正しくない．エネルギーは質量と同等で質量は重力の効果をもつ．光でさえも，重力効果をもち，光は太陽によって曲げられる．よって，作用と反作用が等しいという法則が定性的に有効であるならば，太陽は光によって引力を受けなければならない．つまり，エネルギー $\hbar\omega$ のフォトンは重力をつくり出す効果をもつということになる．問題は，基底状態のエネルギー項 $\hbar\omega/2$ も何らかの効果をもつのだろうかということになる．物理的な問題として述べれば，真空は一様な密度の質量として重力場をつくるのであろうか，ということである．

空間の大部分は真空であるから，電磁場の真空状態エネルギーの効果は大きいことになる．その大きさを評価することができる．まず，量子電気力学に現れる他の発散は切断則と呼ばれる特別の仮定によって避けている，ということを指摘しておく．この規則は，非常に高い振動数（短波長）をもつモードを考慮から外すというものである．この規則の基礎は，電磁気学の法則がこれまで観測されてきた波長よりも短い波長についても成り立つという保証が何もないということである．実際，短波長領域に法則を拡張することができないというもっともな理由がある．長波長

で有効な数学的表現を短波長領域に拡張すると，発散を生じる．問題とする波長は陽子の Compton 波長の程度である．この波長に $1/2\pi$ を掛けたものは $\hbar/Mc \simeq 2\times 10^{-14}$ cm である．

この評価に関して，波長についての和を極限値 $k_{max}=Mc/\hbar$ まで行うものとする．状態についての和を積分で近似すると，単位体積当たりの真空状態エネルギーは

$$\frac{E_0}{\text{単位体積}}=2\frac{\hbar c}{2(2\pi)^3}\int_0^{k_{max}}dk\ 4\pi k^2\cdot k=\frac{\hbar c k_{max}^4}{8\pi^2} \tag{9-41}$$

である（最初の因子 2 に注意せよ．各々の k に対して 2 つのモードがあるからである）．このエネルギーと等価な質量はこの結果を c^2 で割ることにより得られる．結果は，

$$\frac{m_0}{\text{単位体積}}=2\times 10^{15}\ \text{g/cm}^3 \tag{9-42}$$

である．

一見したところ，このような質量密度は少なくとも大変大きな重力効果を引き起こすように思われるが，実際には観測されない．計算が単純すぎる可能性もある．一般相対性理論による効果（たとえば，大きな応力によって生じる重力効果）をすべて含めるならば，諸効果が打ち消し合うのかも知れない．しかしこれを徹底的に研究した人はいない．真空状態のエネルギー密度を有限にするだけでなく，相対論的不変性をもたらすような切断操作が得られる可能性がある．この結果の意味するところは今のところ完全にはわかっていない．

現在のところ，真空状態のエネルギー密度を 0 としても問題はない．現在までのところ，この仮定に反する実験は行われていない．量子電気力学の分野にさらに進むと，避けることがもっと困難な積分の発散が現れる．

真空の波動関数　振動子の集まりの波動関数はそれぞれのモードの波動関数の積である．基底状態については振動子 1, **k** の波動関数は $\exp[-(ck/2\hbar)a_{1\mathbf{k}}^*a_{1\mathbf{k}}]$ に比例するので，基底状態（すなわち，真空状態）にある全系の波動関数は規格化定数を除いて

$$\Phi_0=\exp\left[-\sum_{\mathbf{k}}\frac{ck}{2\hbar}(a_{1\mathbf{k}}^*a_{1\mathbf{k}}+a_{2\mathbf{k}}^*a_{2\mathbf{k}})\right] \tag{9-43}$$

となる．

問題 9 - 6　正弦モード，余弦モード，実数変数を用いて，複素数による (9-43) の式がたしかに正しいことを示せ（問題 8 - 4 を参照）.

問題 9 - 7　真空状態に対して $a^*_{1\mathbf{k}}a_{1\mathbf{l}}$ の平均値が $(\hbar/2kc)\delta_{\mathbf{kl}}$ であることを示せ．整数 r に対して $(a^*_{1\mathbf{k}}a_{1\mathbf{l}})^r$ の平均値に対する公式を導き，$\mathbf{p}\neq\mathbf{k}$ に対して $(a^*_{1\mathbf{k}}a_{1\mathbf{k}})^r(a^*_{1\mathbf{p}}a_{1\mathbf{p}})^s$ のような量の平均値を求める方法を説明せよ．$(a_{1\mathbf{k}})^2$ や $(a^*_{1\mathbf{k}})^2$ の平均値が 0 であることを示せ．任意の奇数個の $\mathbf{a}$ の積の平均は 0 であることを示せ．また真空状態に対して a と a^* の任意の積の期待値が計算できることを示せ．

問題 9 - 8　状態 $\mathbf{1k}$ にあるフォトンがちょうど 1 個ある状態に対して波動関数の中のすべての因子は ϕ_1 を除いて ϕ_0 である．しかし，1 個の振動子について $\phi_1(q)=q\phi_0(q)$ である．励起状態の進行波を表す波動関数は，余弦モードが励起された状態と，正弦モードが励起された状態に i を掛けたものとの線形重ね合わせである．状態 $\mathbf{1k}$ にちょうど 1 個のフォトンがある状態の波動関数が $a^*_{1\mathbf{k}}\Phi_0$ であることを示せ．これは規格化されていない．規格化は $\int\Phi_0^* a_{1\mathbf{k}}a^*_{1\mathbf{k}}\Phi_0$ であり，真空状態についての $a_{1\mathbf{k}}a^*_{1\mathbf{k}}$ の期待値である．前問でこれが $\hbar/2kc$ であることを見た．よって規格化した 1 光子状態は $\sqrt{2kc/\hbar}\,a^*_{1\mathbf{k}}\Phi_0$ である．

9 - 4　場と物質の相互作用

輻射場と物質の相互作用を扱うことは形式的にはむずかしくない．もちろん，(9 -30)，(9-31)，(9-33) の作用の式から，輻射場と相互作用している物質系を扱わなければならないし，振幅を次の式から求めなければならない．

$$\text{振幅}=\int\prod_{i\mathbf{k}}\mathcal{D}\mathbf{q}_i\mathcal{D}a_{1\mathbf{k}}\mathcal{D}a_{2\mathbf{k}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(S_{mat}+S_{int}+S_{rad})\right] \qquad (9\text{-}44)$$

輻射場の振動子の座標の積分は直ちに求めることができる．なぜなら，座標は 2 次形式で表されるからである．この積分を次節で行う．

原子からの放射　この問題を複雑にしている原因の一部は，多くの座標と状態があることによる混乱である．よってわれわれはことの内容をまず理解するために，簡単な問題を扱うことから始めよう．摂動論を用いて，1 個の原子によって光が放射される確率の問題を解く（光と物質の相互作用 S_{int} は小さいと仮定して 1 次まで展開する）．

S_{int} を無視すると，輻射場と物質は独立な系である．原子だけの状態は，さまざまな N に対してエネルギー e_N をもち，その波動関数を $\Psi_N(\mathbf{q})$ とする．ここで $\mathbf{q}$ は原子の中のすべての粒子の座標 $\mathbf{q}_i$ を表す．輻射場の状態は，すべての整数 $n_{1\mathbf{k}}$，$n_{2\mathbf{k}}$ の値を与えることにより定義される．物質と輻射とを合わせた系のエネルギーは

$$E=e_N+\sum_k(n_{1\mathbf{k}}+n_{2\mathbf{k}})\hbar kc \tag{9-45}$$

である．この状態の波動関数は積の形になる．

$$\Psi=\Psi_N(\mathbf{q})\Phi(n_{1\mathbf{k}},n_{2\mathbf{k}}) \tag{9-46}$$

ここで $\Phi(n_{1\mathbf{k}},n_{2\mathbf{k}})$ は輻射場に対する波動関数である（調和振動子波動関数の積である）．

原子による光子の放射を扱うには，初期状態として原子がある準位 M にあって光子は存在しない場合（すべての $n_{1\mathbf{k}}$，$n_{2\mathbf{k}}$ が 0）を考える．この波動関数は

$$\Psi_i=\Psi_M(\mathbf{q})\Phi_0 \tag{9-47}$$

である．Φ_0 は (9-43) に与えられている．終状態では原子は他の状態 N にあって光子も存在する．その運動量を $\mathbf{l}$ とし偏極を 1 とする．問題9-8によると輻射場だけの波動関数は $a_{11}^*\Phi_0$ であるから，完全な終状態の波動関数は

$$\Psi_f=\sqrt{\frac{2lc}{\hbar}}\,\Psi_N(\mathbf{q})\,a_{11}^*\Phi_0 \tag{9-48}$$

である．毎秒当たりの遷移確率を求めるには（1次まで），(6-79) により，これらの状態間の摂動ポテンシャルの行列要素 V_{fi} が必要であることがわかる．摂動の作用は (9-32) で定義されたような S_{int} であり，対応するポテンシャルは

$$V=\sqrt{4\pi}\sum_{\mathbf{k}}(a_{1\mathbf{k}}^*j_{1\mathbf{k}}+a_{1\mathbf{k}}j_{1\mathbf{k}}^*) \tag{9-49}$$

である．ここで問題9-2のように $j_{1\mathbf{k}}$ は原子変数に依存する．この行列要素は

$$V_{fi}=\int dq\prod_{\mathbf{k}}da_{1\mathbf{k}}da_{2\mathbf{k}}\Psi_N^*\Phi_0^*\sqrt{\frac{2lc}{\hbar}}a_{11}\sum_{\mathbf{k}}\sqrt{4\pi}(a_{1\mathbf{k}}^*j_{1\mathbf{k}}+a_{1\mathbf{k}}j_{1\mathbf{k}}^*)\Psi_M\Phi_0 \tag{9-50}$$

である．よって

$$V_{fi}=\sum_{\mathbf{k}}\sqrt{\frac{8\pi lc}{\hbar}}\int\prod_{\mathbf{k}}da_{1\mathbf{k}}da_{2\mathbf{k}}\Phi_0^*a_{11}a_{1\mathbf{k}}^*\Phi_0\int dq\,\Psi_N^*j_{1\mathbf{k}}\Psi_M$$
$$+\sum_{\mathbf{k}}\sqrt{\frac{8\pi lc}{\hbar}}\int\prod_{\mathbf{k}}da_{1\mathbf{k}}da_{2\mathbf{k}}\Phi_0^*a_{11}a_{1\mathbf{k}}\Phi_0\int dq\,\Psi_N^*j_{1\mathbf{k}}^*\Psi_M \tag{9-51}$$

が得られる．なぜなら j のみが $\mathbf{q}$ によるからである．真空状態に対する a の期待値は問題9-7で求めた．すなわち，$\mathbf{k}=\mathbf{l}$ 以外では

$$\int \prod_{\mathbf{k}} da_{1\mathbf{k}} da_{2\mathbf{k}} \Phi_0^* a_{1\mathbf{l}} a_{1\mathbf{k}}^* \Phi_0 = 0$$

であり，$\mathbf{k}=\mathbf{l}$ のときは $\hbar/2lc$ となる．行列要素 $\int \Psi_N^* \mathbf{j} \Psi_M$ を $(\mathbf{j})_{NM}$ と書くことにしよう．すると上の行列要素は $\sqrt{2\pi\hbar/lc}\,(j_{11})_{NM}$ と書ける．毎秒当たりの遷移確率は，[(6-94) を見よ]，

$$\left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)\left(\frac{2\pi\hbar}{lc}\right)|j_{11}|^2_{NM}\delta(E_M - E_N - \hbar lc) \tag{9-52}$$

である．

通常，1つの特定の光子を励起する問題には興味がなく，むしろある小さい立体角 $d\Omega$ に光子が放出される確率を調べたい．この方向に対応するすべての $\mathbf{l}$ の値について和をとらなければならない．単位体積当たりの $\mathbf{l}$ の値の数は $d^3\mathbf{l}/(2\pi)^3$ である．すなわち，$\mathbf{l}$ が特定の方向にある場合，$l^2 dl d\Omega/(2\pi)^3$ を dl について積分しなければならない．よって毎秒当たり1つの遷移が起こる確率は

$$\frac{dP}{dt} = d\Omega \int \frac{dl}{(2\pi)^3} \frac{(2\pi)^2}{lc} |j_{11}|^2_{NM}\delta(E_M - E_N - \hbar lc) l^2 \tag{9-53}$$

である．l についての積分を行うと，偏極1で方向 $\mathbf{l}$ の光が立体角 $d\Omega$ の方向に放出される遷移確率は

$$\frac{dP}{dt} = \frac{\omega}{2\pi\hbar c^3}|j_{11}|^2_{NM} d\Omega \tag{9-54}$$

となる．放出される振動数は

$$\omega = lc = \frac{E_M - E_N}{\hbar} \tag{9-55}$$

を満たす．

問題 9-9　非相対論的に運動している複雑な系に対して，

$$(j_{1\mathbf{k}})_{NM} = \sum_b (e_b \mathbf{e}\cdot\dot{\mathbf{q}}_b e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}_b})_{NM} \tag{9-56}$$

である．ここで $\mathbf{e}$ は光の偏極の方向の単位ベクトルであり，e_b，$\mathbf{q}_b$ は b 番目の粒子の電荷と位置である．光の波長が原子の大きさと較べて非常に大きいものと仮定する．すなわち，b 番目の電子の位置を記述する波動関数の絶対値の2乗が $1/k$ と較べて小さい距離で0になるものと仮定する．このとき，$\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}_b/\hbar)$ を1で近似することができ，行列要素を

$$(j_{1\mathbf{k}})_{NM}=i\omega\mathbf{e}\cdot\boldsymbol{\mu}_{NM} \tag{9-57}$$

と書くことができることを示せ．ここで

$$\boldsymbol{\mu}_{NM}=\sum_b(e_b\mathbf{q}_b)_{NM} \tag{9-58}$$

である．関数 $\boldsymbol{\mu}_{NM}$ は原子の**電気双極子モーメントの行列要素**と呼ばれる．(9-57) を導くのに用いた近似を**双極子近似**と呼ぶ．単位時間に任意の方向に光が放出される全確率は

$$\frac{dP}{dt}=\frac{4\omega^3}{3\hbar c^3}|\boldsymbol{\mu}_{NM}|^2 \tag{9-59}$$

である．[$\mathbf{e}$ が $\mathbf{k}$ に垂直であることおよび偏極に 2 つの方向があることを考慮して，すべての方向について (9-54) を積分せよ．]

電磁場変数の消去　輻射場は 2 次形式の作用汎関数で表現されているので，輻射場のすべての変数について積分することができる．これをここで行う．(9-44) のすべての変数 $a_{1\mathbf{k}}$，$a_{2\mathbf{k}}$ について積分する．輻射場の初期状態と終状態を特定しなければならない．まず，初めと終わりで真空であるというもっとも簡単な場合を扱う．つまり，すべての振動子が光子数 0 の状態から 0 の状態になるものとする．この振幅は次のように書かれる．

$$振幅=\int\mathcal{D}q\; e^{\left(\frac{i}{\hbar}\right)S_{mat}}X[q] \tag{9-60}$$

ここで

$$X[q]=\int\prod_{\mathbf{k}}\mathcal{D}a_{1\mathbf{k}}\mathcal{D}a_{2\mathbf{k}}\;\; e^{(i/\hbar)(S_{int}+S_{rad})} \tag{9-61}$$

は粒子の位置 q の汎関数である．q は電流変数 $\mathbf{j}$ の式 (9-16) に現れる．作用はそれぞれのモードからの寄与の和 $\sum_{\mathbf{k}}(S_{1\mathbf{k}}+S_{2\mathbf{k}})$ であり，それぞれは

$$S=\int dt\;\left[\sqrt{4\pi}(ja^*+j^*a)+\frac{1}{2}\dot{a}^*\dot{a}-\frac{k^2c^2}{2}a^*a-\frac{\hbar kc}{2}\right] \tag{9-62}$$

という形をしているから，明らかに X は各モードに対応する因子の積で表される．1 つの典型的なモードに対する積分

$$X_{1\mathbf{k}}=\int\mathcal{D}a_{1\mathbf{k}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int dt\left\{\sqrt{4\pi}(j_{1\mathbf{k}}a_{1\mathbf{k}}^*+j_{1\mathbf{k}}^*a_{1\mathbf{k}})+\frac{1}{2}\dot{a}_{1\mathbf{k}}^*\dot{a}_{1\mathbf{k}}-\frac{k^2c^2}{2}a_{1\mathbf{k}}^*a_{1\mathbf{k}}-\frac{\hbar kc}{2}\right\}\right]$$

$$=\exp\left[-\frac{4\pi}{2\hbar}\int dt\int ds\; j_{1\mathbf{k}}(t)j_{1\mathbf{k}}^*(s)\frac{1}{2kc}e^{-ikc|t-s|}\right] \tag{9-63}$$

は，すでに何度も行った経路積分のタイプである．相違点は複素数を用いただけ複雑になっている点であるが，これは実数に還元できる．実際，これはまさに8-9節で議論した問題である．(8-136) の相互作用関数 $\gamma(t)$ はここでは $\gamma=\sqrt{4\pi}j_{1\mathbf{k}}$，$\omega=kc$ である．(9-63) の最終表式は (8-138) と等価である．それぞれの $\mathbf{k}$ と偏極に対する因子の積より，$X=e^{iI/\hbar}$ が得られる．ここで

$$I=\frac{i}{2}\sum_{k}\int dt\int ds[j_{1\mathbf{k}}(t)j^{*}_{1\mathbf{k}}(s)+j_{2\mathbf{k}}(t)j^{*}_{2\mathbf{k}}(s)]\frac{4\pi}{2kc}e^{-ikc|t-s|} \tag{9-64}$$

である．よって真空から真空への遷移の問題は完全に解けて粒子変数についてのみの経路積分の形に表される．

$$\text{振幅}=\int\mathcal{D}q\,e^{(i/\hbar)(S_{mat}+I)} \tag{9-65}$$

この結果から導かれる帰結のいくつかを議論する（初めと終わりの状態が真空でない場合については次節で述べる）．

結果は単に次のようなことである．物質の作用は S_{mat} でなく，修正された作用 $S'_{mat}=S_{mat}+I$ である．この修正は電磁場との反作用によるものである．これは厳密な古典論の意味において正しくない．なぜなら，作用 I は複素数だからである．S'_{mat} の実数部分だけに対して最小作用の原理を用いることから得られる古典物理学は Maxwell 方程式と Newton の法則を組みあわせたものと厳密に一致する．しかし，これは Maxwell 方程式を遅延波のみを用いて解く場合に対応しない（実際，物質変数のみが現れている作用についての最小原理によっては遅延波に限定した場合を表すことができない．むしろ，先行解と遅延解とを半分ずつ用いることに対応する*)）．I に対する完全に量子力学的な複素数の表現は正しい．その帰結を調べてみよう．

1次摂動展開　q についての積分を厳密に実行することは複雑すぎる．I の中の電流の式に粒子の電荷 e が現れるので，I は e^2 に比例する．これを無次元量で表したものが微細構造定数

$$\frac{e^2}{\hbar c}=\frac{1}{137.039}$$

である．この厳密な値と意味は実験的にしかわかっていないが，これは小さい数で

---

*) J.A. Wheeler and R.P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* **17** (1945) 157.

ある．よって I の効果は小さいものと考えられる．Schrödinger 理論が，たとえば，原子準位を極めて正確に与えることをすでに知っている．I を無視することからくる誤差はほんのわずかである．e^2 について1次の I の効果を見てみよう．これは (9-32) のもとの作用の e について2次に対応する． 6-5節で定義された遷移振幅 λ_{MM} を考えよう．ここで物質系は状態 M に始まって M に終わる．I を無視すると，0次は

$$\lambda_{MM}^{0}=e^{-(i/\hbar)E_M T} \tag{9-66}$$

となる． 1次の項は

$$\begin{aligned}\lambda_{MM}^{1}&=\frac{1}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}\mathscr{D}q(t)\,\Psi_M^*(q_f)e^{(i/\hbar)S_{mat}}iI\Psi_M(q_i)\\&=-\frac{1}{2\hbar}\int_{t_i}^{t_f}\mathscr{D}q(t)\,\Psi_M^*(q_f)e^{(i/\hbar)S_{mat}}\\&\quad\times\int dt\int ds\sum_{\mathbf{k}}[j_{1\mathbf{k}}^*(t)j_{1\mathbf{k}}(s)+j_{2\mathbf{k}}^*(t)j_{2\mathbf{k}}(s)]\frac{4\pi}{2kc}e^{-ikc|t-s|}\Psi_M(q_i)\end{aligned} \tag{9-67}$$ *)

である．$t>s$ とし，結果を2倍にする．同様の式は5-1節で求めてある．ここでは

$$\lambda_{MM}^{1}=-\frac{i}{\hbar}(\varDelta E)Te^{-iE_M T/\hbar}$$

となる．ここで

$$\begin{aligned}\varDelta E&=i\sum_N\sum_{\mathbf{k}}\frac{4\pi}{2kc}\,[(j_{1\mathbf{k}}^*)_{MN}(j_{1\mathbf{k}})_{NM}+(j_{2\mathbf{k}}^*)_{MN}(j_{2\mathbf{k}})_{NM}]\int_0^\infty d\tau e^{(i/\hbar)(E_M-E_N-\hbar kc)\tau}\\&=\sum_N 4\pi\hbar\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\,[|(j_{1\mathbf{k}})_{NM}|^2+|(j_{2\mathbf{k}})_{NM}|^2][2kc(E_M-E_N-\hbar kc+i\varepsilon)]^{-1}\end{aligned} \tag{9-68}$$

これは実数部と虚数部をもち，次のように表される．

$$\varDelta E=\delta E-\frac{i\hbar\gamma}{2}$$

実数部 δE は原子のエネルギー準位の小さなずれを表し，Lamb シフトと呼ばれる．このずれは Lamb と Rutherford によって実験的に発見された．これは

$$\delta E=\sum_N\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\,[|(j_{1\mathbf{k}})_{NM}|^2+|(j_{2\mathbf{k}})_{NM}|^2]P.P.(E_M-E_N-\hbar kc)^{-1}\,\frac{4\pi\hbar}{2kc} \tag{9-69}$$

であり，虚数部は

$$\frac{\hbar\gamma}{2}=\sum_N\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\,[|(j_{1\mathbf{k}})_{NM}|^2+|(j_{2\mathbf{k}})_{NM}|^2]\pi\delta(E_M-E_N-\hbar kc)\,\frac{4\pi\hbar}{2kc} \tag{9-70}$$

---

*）　この表式において，経路積分の中に初期条件 q_i，終条件 q_f についての積分も含まれている．

である．

光子を放出しないで原子が励起状態に留まっている振幅は $\exp[-i(E_m+\delta E-i\gamma/2)T/\hbar]$ のように変化し，確率は $e^{-\gamma T}$ となる．すなわち，状態 M に留まる確率は減衰速度 γ で減少する．物理的に，状態 M にある原子は光子を放出して低い状態 N に落ちることができるから，確率が減少するのである．(9-53)からわかるように，(9-70)の γ はたしかに状態 M からすべての低い状態 N への遷移速度を合わせたものである．

9-5　輻射場中の孤立電子

エネルギー補正　電磁場によるエネルギーの補正 δE を調べるために，もっとも簡単な場合を考える．物質系にただ1個の運動する電荷が存在する場合である（たとえば，無限に重い原子核をもつ水素原子や真空中の自由電子など）．その電荷の座標を $\mathbf{R}$ とする．よって $\mathbf{j}=\mathrm{e}\dot{\mathbf{R}}\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}/\hbar)$．$\mathbf{j}$ は $\dot{\mathbf{R}}$を含む．2次の項を考察する際に7-3節で述べたように適切な注意が必要である．δE に対しては速度の2次の項からくる付加項がある．7-5節のように $\dot{\mathbf{R}}$ を運動量演算子 $\mathbf{p}$ で表すと，次の式が得られる．

$$\delta E_1=\sum_N\int\frac{d^3\mathbf{k}}{2kc(2\pi)^3}\left(|\mathbf{p}_1e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}|^2_{NM}+|\mathbf{p}_2e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}|^2_{NM}\right)\frac{4\pi\mathrm{e}^2\hbar}{m^2(E_M-E_N-\hbar kc)}$$
$$+\frac{4\pi\mathrm{e}^2}{m}\int\frac{\hbar}{2kc}\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\tag{9-71}$$

問題 9-10　行列要素において演算子を注意深く対称化して $1/2[\mathbf{p}_1\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}/\hbar)+\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}/\hbar)\mathbf{p}_1]$ と書く必要がないのはなぜか．

もっとも簡単な場合として，静止している自由電子を考えよう．場の中のエネルギーに対して得られる δE_R は静止エネルギーに対する補正を表す．すなわち，相対論より導かれるように，質量に対する補正 $\delta m=\delta E_R/c^2$ である．これがいわゆる**電磁場による質量補正**である．静止している自由電子に対して，状態は平面波で表される．状態 M と N における運動量を $\mathbf{p}_M$，$\mathbf{p}_N$ とすると，$\mathbf{p}_N=\mathbf{p}_M-\mathbf{k}$ でなければ，行列要素 $[\mathbf{p}_1\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}/\hbar)]_{NM}$ は0となる．よって初めに静止していた電子に対して，行列要素は0で δE_R はちょうど (9-71) の最後の積分となり，これは無限大となってしまう．

短波長の困難　これだけがすべてではない．S_c において項 $\rho_{\mathbf{k}}\rho_{\mathbf{k}}/2k^2$ を消去するとき，これが電荷間の相互作用 $\frac{1}{2}\sum_{i,j}\frac{e_ie_j}{|\mathbf{q}_i-\mathbf{q}_j|}$ を表すということを指摘した．しかし，無限大の項 $i=j$ を和の中に含めるべきであることを指摘しなかった．たしかに，1個の粒子については $\rho_{\mathbf{k}}=\mathrm{e}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}}$ であるから，$\frac{1}{2}|\rho_{\mathbf{k}}|^2k^2=\frac{4\pi\mathrm{e}^2}{2k^2}$ である．よってこの項は $4\pi\mathrm{e}^2\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{k^2}{2}$ となる．この無限大と δE_R の中の無限大は打ち消し合わないので，困難が現実のものとなる．運動量 k についての積分が2次で発散する．量子電気力学はナンセンスな結果を与えるのである．

たしかにわれわれは荷電粒子について非相対論的扱いを行っている．物質の扱いを相対論的にしても(量子電気力学は変わらない)，発散の程度は変わっても発散という結果を避けることができない．パイ中間子のようなスピン0の粒子に対しては発散の次数が変わらない．やはり2次の発散である．質量補正の実験値が一応得られている．わかっている範囲では，他の相互作用についても調べた結果，電荷をもつパイ中間子と中性のパイ中間子との相違は電荷だけである．つまり電磁場との結合の仕方が異なる．実際電荷をもつパイ中間子の質量 m_π は電子質量の273.2倍で，中性のパイ中間子の質量は電子質量の264.2倍であるが，この差(電子質量の9.0倍＝$0.034m_\pi=4.6$ MeV）は電磁場のエネルギーである．

積分の上限を高い運動量 $k_{\max}$ におくと（これは相対論的に不変な操作ではない)，(9-71)の最後の項からエネルギー $\mathrm{e}^2(k_{\max})^2/2\pi m_\pi c$ が得られる．$\hbar k_{\max}/c$ が π 中間子の質量 m_π よりもずっと大きい場合，これは最大の項となる．これが $0.034m_\pi c^2$ と等しいならば，$(\mathrm{e}^2/2\pi\hbar c)(\hbar k_{\max}/m_\pi c)^2=0.034$ となり，すなわち，

$$k_{\max}\approx\frac{5.4m_\pi c}{\hbar}\approx\frac{0.8Mc}{\hbar}$$

である．ここで M は陽子の質量である．(相対論によっても，切断をだいたい同じエネルギーにとると，$\Delta E=0.034m_\pi c^2$ となる．)それゆえに，今日の量子電気力学(つまり光子と相互作用する「粒子」)の定式化は不完全である．陽子の質量を超えるエネルギーや，それに対応する振動数，波数を扱う方法に問題がある．波長が約 $4\pi\times10^{-14}$ cm 以下のモードを扱うときに困難が生じるのである．

スピン1/2をもつ電子について，Dirac の理論は電子がある磁気モーメントをもたなければならないことを示す．このような磁気モーメントがあると，負の磁気エ

ネルギーがほとんど完全に正の電気エネルギーと打ち消し合う．差は発散するが，対数的であるにすぎない．波長に関する積分において切断を導入し，上に示した k_{max} を上限にとると電子質量に対する補正は3％程度となるが，これを確かめることができない．なぜなら，電子には中性の類似物がないからである．

陽子の場合，異常磁気モーメントは大変大きいので磁気エネルギーが電気エネルギーを圧倒し補正は負となる．中性子も磁石である．よって補正は負である．陽子のモーメントのほうが高いので，中性子のほうが陽子よりも重いという事実が説明できそうである．陽子質量程度のエネルギーのところで積分を切断すると，差が正しく得られる．しかし質量差として 782.71±0.40 keV*)のように正確に知られているエネルギーを計算する方法としては荒すぎる．これらの質量差（陽子と中性子，電荷をもつ π 中間子と中性の π 中間子，正や負の電荷をもつ σ 中間子と中性の σ 中間子，電荷をもつ K 中間子と中性の K 中間子など）は現代物理学に対する重大な挑戦であり，おそらく量子電気力学の弱点を指摘することにより電磁気効果を計算するための完全な理論をもたらすであろう．不完全なのは真に量子電気力学なのか粒子内の電荷分布に対する仮定なのかわからない．これらの粒子とその間の相互作用に対するもっと完全な理論が得られたときに，現在の量子電気力学の限界（もしあるとすれば）が明らかとなろう．

9-6　Lamb シフト

Schrödinger 方程式によると，水素原子の第2準位は縮退している．$2s$ 準位と $2p$ 準位が同じエネルギーで現れる．同様に Dirac 方程式について $2s_{1/2}$ と $2p_{1/2}$ の縮退対がある．しかし Lamb と Rutherford は1946年に小さいエネルギー差があることを見つけた．それは 3×10^6 分の1程度で，振動数にして1057.1メガサイクルだけ $2s_{1/2}$ の方が高い．

このようなエネルギー差が I という項からきていることを理論家が予想したのであるが，1947年の Bethe と Weiskopf の仕事が出る前は積分の発散の無限大がこのエネルギー差を計算するのを困難にしていた．Bethe と Weiskopf の理論は次のようなものである．

---

*）Eveling et al., *Nucl, Phys.* **15**（1960）342の354ページ．

まず,

$$\frac{1}{E_M-E_N-\hbar kc}=\frac{1}{\hbar kc}\frac{E_M-E_N}{E_M-E_N-\hbar kc}-\frac{1}{\hbar kc} \tag{9-72}$$

より，エネルギー (9-71) は 3 つの項の和として表された.

$$\delta E=\delta E'+\delta E''+\delta E''' \tag{9-73}$$

ここで

$$\delta E'=\frac{2\pi e^2}{m^2c^2}\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3k^2}\sum_N\frac{(E_M-E_N)(|\mathbf{p}_1e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}|^2_{NM}+|\mathbf{p}_2e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}|^2_{NM})}{E_M-E_N-\hbar kc} \tag{9-74}$$

$$\delta E''=-\frac{2\pi e^2}{m^2c^2}\int\frac{d_3\mathbf{k}}{(2\pi)^3k^2}\sum_N(|\mathbf{p}_1e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}|^2_{NM}+|\mathbf{p}_2e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}|^2_{NM}) \tag{9-75}$$

$$\delta E'''=\frac{2\pi e^2\hbar}{mc}\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3k} \tag{9-76}$$

である．項 $\delta E'''$ と Coulomb 項 δE_c の無限大とは電子の状態に依存しない．将来の理論でこれらが有限になるものと期待される．その際に電子の静止質量にある補正 δm を加えることになるだろう．m_0 が力学的質量であるとき，実際の実験の質量は $m=m_0+\delta m$ となる．ここで $\delta mc^2=\delta E'''+\delta E_c$ である．水素原子の全エネルギー(粒子の静止質量と結合エネルギーを含む) の中で，このような静止質量補正が予想されることはもちろんである．一方，イオン化した自由粒子状態を基準にした結合エネルギーをすべて測定するときに，この補正は入っている．よって δm の項は同定される．なぜなら，これは静止した電子に対する唯一の項であり電子の運動あるいは状態に依存しないからである．

項 $\delta E''$ は簡単化できそうである．N についての和は $(p_1^2+p_2^2)_{MM}$ を与えるものと考えられる(行列の乗法により)．$\mathbf{k}$ をすべての方向について積分すると，$2/3\,(\mathbf{p}\cdot\mathbf{p})_{MM}$ となり，

$$\delta E''=-\frac{(\mathbf{p}\cdot\mathbf{p})_{MM}}{2m}\frac{8\pi e^2}{3mc^2}\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3k^2}\,. \tag{9-77}$$

ここでもこの項が将来有限になることが期待される．この項は自由電子に対しても存在する．その解釈は次のようである．力学的運動エネルギー $p^2/2m_0$ は質量が変わると変化し

$$\frac{p^2}{2m}\simeq\frac{p^2}{2m_0}\left(1-\frac{\delta m}{m_0}\right) \tag{9-78}$$

となる．項 $\delta E'''$ は $-(p^2/2m_0)\delta m$ を表さなければならない．しかしすでにこの項は考慮されている．なぜなら，Schrödinger 方程式のエネルギー準位を実験値の質量

m を用いて $p^2/2m$ という形に求めるからである．この項は運動する自由電子に対する唯一の付加項であり，また運動エネルギーに比例するので同定できる*)．最後に，これらの項についての解釈が間違っているとしても，$2s$ 状態と $2p$ 状態とについて δE の差を計算する際にこれらの項は落ちてしまう．なぜなら，$(p^2/2m)_{MM}$ は 2 つの状態 $2s$，$2p$ について同じであるので $\delta E''$ は同じであるし，$\delta E'''$ と δE_c はすべての状態で同じだからである．

残りの項 $\delta E'$ について，双極子近似が十分であるという議論をした．その場合，行列要素は $\mathbf{k}$ に依存しない．そして

$$\int \frac{d^3\mathbf{k}}{k^2} \frac{1}{E_M - E_N - \hbar kc} = \frac{4\pi}{\hbar c} \ln \frac{\hbar k_{\max} c}{E_M - E_N} \tag{9-79}$$

であるから，

$$\delta E' = \frac{2}{3} \frac{e^2}{\pi m^2 \hbar c^3} \sum_M \left[\ln \left(\frac{\hbar k_{\max} c}{E_M - E_N} \right) \right] (E_M - E_N) |\mathbf{p}_{NM}|^2 \tag{9-80}$$

が得られる．

水素については，状態と行列要素がわかっているから，和を実行することができる．唯一の問題点は $\hbar k_{\max} c$ の値である．Bethe は，非相対論の近似がここで破れ，完全に相対論的な計算をすれば $\hbar k_{\max} c$ が mc^2 程度の量になるであろう，と述べた．$\hbar k_{\max} c = mc^2$ とおくと，1000メガサイクルという値が得られたので，Bethe は自分の推論は正しいと考えた．

残された問題は，Dirac の波動方程式と状態を用いて相対論的計算を行うことである．このようにして初めて有効な $k_{\max}$ を精密に決めることができるであろう．これは極めて厄介である．なぜなら，さまざまな無限大項を同定することが困難であるからである．ただ単にある最大運動量のところで切断し差を見るというだけではうまくいかない．なぜなら，運動量とエネルギーを別の仕方で扱っているので，必ずしも相対論的に不変な手続きでないからである（これから得られる結論の 1 つはすでに脚注で指摘した）．この厄介さを解決する方法を Schwinger は展開した．彼は計算の途中で相対論的対称性を明確にし無限大項を同定する方法を示した．Feynman によるもう 1 つの方法は無限大の積分を切断するために相対論的に不変な手

---

*） (9-77) によると $\delta m = \frac{8\pi e^2}{3c^2} \int \frac{d^3\mathbf{k}}{k^2}$ であるが，静止した電子に対して $\delta E/c^2$ より得られる δm と等しくない．これは，非相対論的近似を行っていることによる．相対論的効果を完全に取り入れると，δm に対する 2 つの計算結果は一致する．

続きを与えるものである．ここでは後者を説明する．

電磁場の全部の効果としてここではCoulomb相互作用も含めることにすると，作用の中に付加項 $I+S_c$ として表される．(9-64)のような I についての式が相対論的に不変であるかどうかは自明ではない．なぜなら，式が $\mathbf{R}$，t あるいは $\mathbf{k}$，ω でなく $\mathbf{k}$，t で表されているからである．I を振動数 ω と波数 $\mathbf{k}$ で表そう．初めに

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{-ikc|\tau|-i\omega\tau}=\frac{2ikc}{\omega^2-k^2c^2+i\varepsilon} \tag{9-81}$$

すなわち，

$$e^{-ik|t-s|c}=\int \frac{d\omega\, 2ikc/2\pi}{\omega^2-k^2c^2+i\varepsilon}e^{i\omega(t-s)} \tag{9-82}$$

ということに注意しよう．次の量を定義する．

$$\begin{aligned} j(\mathbf{k},\omega)&=\int dt\ j_{\mathbf{k}}(t)e^{i\omega t} \\ &=\int d^3\mathbf{R}\int dt\ j(\mathbf{R},t)e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}-\omega t)} \end{aligned} \tag{9-83}$$

このとき，I は次のようになる．

$$I=-2\pi\iint\frac{d^3\mathbf{k}\,d\omega}{(2\pi)^4}\,\frac{|j_1(\mathbf{k},\omega)|^2+|j_2(\mathbf{k},\omega)|^2}{\omega^2-k^2c^2+i\varepsilon} \tag{9-84}$$

この式が ω と $\mathbf{k}$ について相対論的対称性をもつことは明らかである．なぜなら，$\omega^2-c^2k^2$ はLorentz変換に対して不変である．しかしながら，流量は相対論的に対称的な形で現れない．ρc と $\mathbf{j}$ は4元ベクトルをなすので，$c^2\rho^2-\mathbf{j}\cdot\mathbf{j}$ のような不変な組み合わせとなることが期待される．しかし，

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{k},\omega)&=\int dt\ \rho_{\mathbf{k}}(t)e^{i\omega t} \\ &=\int dt\int d^3\mathbf{R}\ \rho(\mathbf{R},t)e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}-\omega t)} \end{aligned} \tag{9-84}$$

を定義すると，作用のCoulomb部分は

$$S_c=\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\int d\omega\frac{[\rho(\mathbf{k},\omega)]^2}{k^2}=\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\int d\omega\,\frac{(\omega\rho/k)^2-\rho^2c^2}{\omega^2-k^2c^2} \tag{9-86}$$

となる．最後の式は分子と分母に ω^2/k^2-c^2 を掛けて得られたものである．流量の保存則

$$-\frac{\partial\rho}{\partial t}=\nabla\cdot\mathbf{j} \tag{9-87}$$

は

$$\omega\rho(\mathbf{k}, \omega)=\mathbf{k}\cdot\mathbf{j}(\mathbf{k}, \omega) \tag{9-88}$$

となる．一方，$\mathbf{k}$ 方向の $\mathbf{j}$ の成分を j_3 と呼ぶことにすると，$\omega\rho/k=j_3$ となり，全部合わせると，

$$I+S_c=-(2\pi)\iint\frac{d^3\mathbf{k}\,d\omega}{(4\pi)^4}\frac{|j_1(\mathbf{k}, \omega)|^2+|j_2(\mathbf{k}, \omega)|^2+|j_3(\mathbf{k}, \omega)|^2-c^2|\rho(\mathbf{k}, \omega)|^2}{\omega^2-k^2c^2+i\varepsilon} \tag{9-89}$$

となる．3 つの j 項の和は $\mathbf{j}(\mathbf{k}, \omega)\cdot\mathbf{j}(\mathbf{k}, \omega)$ そのものであるから，4 次元不変性は明らかである．

ここで次のことが示唆される．今のところこれ以上どうしようもないので，(9-89) において

$$\left(\frac{-\Lambda^2}{\omega^2-k^2c^2-\Lambda^2+i\varepsilon}\right)^2$$

のような因子を掛けることにより積分を人工的に収束させる．ここで Λ はある非常に高い振動数である．ω と k が小さい値のとき，この因子は 1 であり，大きい値のときは積分を切断する．さらに，このような因子は明らかに式の相対論的不変性を壊さない．すべての物理量は，$I+S_c$ がこの切断因子を含んでいると仮定することにより求められる．Λ の大きな値に対してこれらの物理量が鈍感である場合（Lamb シフトのように），理論値は信用できる．これに反して，理論の結果が Λ に敏感に依存する場合(電荷をもつパイ中間子と中性の中間子の質量差の場合)，その結果に定量的意味を与えることができない．なぜなら，切断関数は任意であり，完全には満足できないものである．これが，量子電気力学の現状である．

問題 9-11　切断関数が完全には満足できるものでないことを次のような議論によって示せ．すなわち，9-4節の方法で求められた γ は切断によって変化するが，実際の光子の放出確率はあまり変化しないであろう．なぜなら光子については $\omega=kc$ の関係があるから切断因子は厳密に 1 になる．よって，確率の収支が合わなくなる(すなわち，原子が放出する確率と放出しない確率との和は 1 とならない)．この問題によって示唆される困難はまだ解決していない．高振動数においてすべての結果を有限にし，相対論的不変性を保ち，すべての事象の確率の和を 1 とするような量子電気力学の修正は知られていない．

問題 9-12　以下の式を用いて $I+S_c$ を空間座標に変換せよ.

$$\iint\frac{d^3\mathbf{k}d\omega}{(2\pi)^4}\frac{ce^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}-\omega t)}}{\omega^2-k^2c^2+i\varepsilon}=\frac{i}{t^2c^2-R^2-i\varepsilon}\frac{1}{(2\pi)^2}=\frac{1}{4\pi}\delta_+(t^2c^2-R^2) \tag{9-90}$$

[関数 $-\pi i/(x-i\varepsilon)$ はしばしば $\delta_+(x)$ と書かれる. ここではこの表記法を導入した.] このとき

$$I+S_c=\frac{1}{2c}\int d^3\mathbf{R}_1\int d_3\mathbf{R}_2\int dt_1\int dt_2\ \delta_+[(t_1-t_2)^2c^2-|\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2|^2]$$
$$\times\delta_+[(t_1-t_2)^2c^2-|\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2|^2] \tag{9-91}$$

となる.

9-7　光の放出

9-4節において物質系が電磁場と相互作用をしながら何かをすることの振幅の式を求めた. それは (9-90) と (9-91) に示した如くである. この導出は場が初めと終わりの両方において光子のない真空状態であるという特別の場合に限定されている. 結果は経路積分の中の作用 S_{mat} を有効作用 $S'_{mat}=S_{mat}+I$ で置き換えるということである. もっと一般の場合, 光子は初めも終わりも存在する. 例として, 初めに光子が存在しないが終状態において運動量 $\hbar\mathbf{L}$ で分極 1 の 1 個の光子が存在する場合を考えよう. この場合に前の計算の中で変えるところは S すなわち (9-61) を定義する積分の中身である. 次の式をこれから用いる.

$$X'=\int\prod_{\mathbf{k}}\mathscr{D}a_{1\mathbf{k}}\mathscr{D}a_{2\mathbf{k}}e^{(i/\hbar)(S_{int}+S_{rad})} \tag{9-92}$$

ここで経路積分は真空の初期状態と真空と光子 1 個を含む終状態との間で実行する. このとき 1L を除くすべての振動子は初期状態 $n=0$ から終状態 $n=0$ になるので, それらの振動子について因子 $X_{1\mathbf{k}}$ は変わらない. 1 個の振動子 1L からの寄与のみが変化する. それについては

$$X'_{1\mathrm{L}}=\int\mathscr{D}a_{1\mathrm{L}}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int dt\left[\sqrt{4\pi}(j^*_{1\mathrm{L}}a_{1\mathrm{L}}+j_{1\mathrm{L}}a^*_{1\mathrm{L}})+\dot{a}^*_{1\mathrm{L}}\dot{a}_{1\mathrm{L}}-L^2c^2a^*_{1\mathrm{L}}a_{1\mathrm{L}}-\frac{\hbar Lc}{2}\right]\right\} \tag{9-93}$$

となる. この式と (9-63) との相違点は, 振動子の経路が前の式ではn=0から$n=0$に到るのに対し $n=0$ から $n=1$ に到るということである. 8-9節で強制調和振動子の振る舞いを調べた. その節の結果を用いて次のように表すことができる.

$$X'_{1L}=\left(\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{Lc}}\int dt\ j_{1L}e^{iLct}\right)X_{1L} \tag{9-94}$$

ここで X_{1L} は前に計算した $n=0$ から $n=0$ に到る経路の因子である．したがって，完全な因子 X' は単純にもとの因子 X に

$$\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{Lc}}\int dt\ j_{1L}e^{iLct}$$

を掛けたものである．よって振幅は

$$\text{振幅}=\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{Lc}}\int\mathcal{D}q\ \ e^{(i/\hbar)(S_{mat}+I)}\int dt\ j_{1L}e^{iLct} \tag{9-95}$$

となる．

前に求めた摂動論の式は遷移要素

$$\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{Lc}}\int\mathcal{D}q\ e^{(i/\hbar)S_{mat}}\int dt\ j_{1L}e^{iLct} \tag{9-96}$$

と等しい．よってこの結果は次に述べる例外を除いて摂動論の結果と同じである．遷移要素は単に S_{mat} だけでなく完全な有効作用 $S'_{mat}=S_{mat}+I$ を用いて計算すべきである．I の効果は前に議論したようにエネルギー準位を少しだけ変化させることである．さらにエネルギー値を事実上複素数にすることでもある．その結果，放射された光はわずかな幅をもったスペクトル線を与える．この幅は線の自然幅と呼ばれる．この計算の詳細には深入りせずにこの計算と多光子への一般化は，特に量子電気力学を詳しく学ぼうとする諸氏の手に残しておく．

9-8　ま　と　め

方法の復習　この章で量子電磁場について多くの解析をした．中心的な考え方と結果について振り返ってみることは意味がある．Coulomb 相互作用を分離することと進行波を用いることとはこの目的を達成するための技術的方法であるが，本質的結果は (9-89) の公式［これと等価なのは (9-91)］である．(9-1) の考え方に現れているようなもっと一般的な観点からこの結果を見てみよう．

次のような作用で表される系を考えよう．

$$S=S_1(\mathbf{q})+S_2(\mathbf{q},\mathbf{A},\phi)+S_3(\mathbf{A},\phi) \tag{9-97}$$

ここで $S_1(\mathbf{q})$ は物質のみの作用である．S_2 は物質と場の相互作用である．S_3 は場のみの作用である．また $\mathbf{q}$ は物質の座標を表し，$\mathbf{A}$, ϕ は場を表す．このとき，任意の事象の振幅は問題の境界条件の下に次のような積分を評価して得られる．

$$K=\int\mathscr{D}\mathbf{q}\int\mathscr{D}\mathbf{A}\int\mathscr{D}\phi\exp\left\{\frac{i}{\hbar}[S_1(\mathbf{q})+S_2(\mathbf{q},\mathbf{A},\phi)+S_3(\mathbf{A},\phi)]\right\} \tag{9-98}$$

このまとめにおいて，場の条件として初めと終わりに光子がないものとする（すなわち，場については基底状態から基底状態への遷移とする）．この条件を *gnd-gnd* *) と表す．後に，初めに $\mathbf{q}$ について積分し次に $\mathbf{A}$，ϕ について積分することの帰結について考える．これまでやってきたことは逆に $\mathbf{A}$，ϕ についての積分を先に行い，次に $\mathbf{q}$ について積分したのである．

通常 $S_2(\mathbf{q},\mathbf{A},\phi)$ は場の変数 $\mathbf{A}$，ϕ について線形であるので，

$$S_2=\int dt\int d^3\mathbf{R}\,[\rho(\mathbf{R},t)\phi(\mathbf{R},t)-\mathbf{j}(\mathbf{R},t)\cdot\mathbf{A}(\mathbf{R},t)] \tag{9-99}$$

と表される．ここで ρ と $\mathbf{j}$ は電荷と電流密度であり $\mathbf{q}$ のみに依存する．$\mathbf{A}$，ϕ についての積分は容易にできる．というのはガウス積分だからである．この積分の値を与えるのが（9-91）である．すなわち，

$$\int_{gnd}^{gnd}\mathscr{D}\mathbf{A}\mathscr{D}\phi\ \exp\left\{\frac{i}{\hbar}[S_3(\mathbf{A},\phi)+\int dt\int d^3\mathbf{R}\,(\rho\phi-\mathbf{j}\cdot\mathbf{A})]\right\}=e^{(i/\hbar)J}. \tag{9-100}$$

ここで J は (9-91) では $I+S_c$ と呼ばれていたものであり，任意の関数 ρ，$\mathbf{j}$ に対し

$$J=i\int dt_1\int dt_2\int d^3\mathbf{R}_1\int d^3\mathbf{R}_2\,[c^2\rho(\mathbf{R}_1,t_1)\rho(\mathbf{R}_2,t_2)-\mathbf{j}(\mathbf{R}_1,t_1)\cdot\mathbf{j}(\mathbf{R}_2,t_2)]$$
$$\times\delta_+[(t_1-t_2)^2c^2-|\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2|^2] \tag{9-101}$$

である．運動量空間での（9-101）の式は（9-89）で表されている．

（9-98）を適用すると，ρ，$\mathbf{j}$ が $\mathbf{q}$ と $\dot{\mathbf{q}}$ の関数であるので，次の結果が得られる．

$$K(gnd,gnd)=\int\mathscr{D}\mathbf{q}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}[S_1(\mathbf{q})+J(\mathbf{q})]\right\} \tag{9-102}$$

ここで $\mathbf{q}$ の汎関数 $J(\mathbf{q})$ は，（9-101）に正しい ρ，$\mathbf{j}$ を代入して得られる．この式によって *gnd-gnd* 遷移が要約される．粒子の作用積分に対する場の補正効果は $S_1(\mathbf{q})$ に $J(\mathbf{q})$ を加えることによって表される．このとき，電磁気学の中心的公式は，（9-100）と（9-101）の一般的結果である．

量子電気力学の一般的定式化　以上のことを別の方向から調べてみるのも興味あることである．まず物質座標について積分し，次いで場の変数について積分するのである．この手続きから得られる結果について簡単に一般的に述べるだけにしておく．

*）　gnd は ground state（基底状態）を表す．

(9-98) において $\mathbf{q}$ についての積分を先にするとき，因子 $\exp\{(i/\hbar)S_3\}$ は定数であり除くことができる．したがって，(9-98) を次のように書くことができる．

$$T[\mathbf{A},\phi]=\int\mathcal{D}\mathbf{q}\,\exp\left\{\frac{i}{\hbar}[S_1(\mathbf{q})+S_2(\mathbf{q},\mathbf{A},\phi)]\right\} \tag{9-103}$$

を定義すると，

$$K=\int\mathcal{D}\mathbf{A}\int\mathcal{D}\phi\,\exp\left[\frac{i}{\hbar}S_3(\mathbf{A},\phi)\right]T[\mathbf{A},\phi] \tag{9-104}$$

となる．この K は粒子がある運動を経て動き，かつ場がある遷移をするという振幅を与える．他のすべての振幅のようにこれもあらゆる可能な選択肢についての和である．それぞれの選択肢は，ある特定の場 $\mathbf{A}$，ϕ の中での運動の振幅 $T[\mathbf{A},\phi]$ に場が $\mathbf{A},\phi$ であるという振幅 $e^{iS_3/\hbar}$ を掛けたものとして構成される．和を実行する際にすべての可能な場 $\mathbf{A}$，ϕ について和をとる．

(9-104) で与えられる法則は量子電気力学のすべてに関わる一般的な基本法則である．汎関数 $T[\mathbf{A},\phi]$ すなわち外場ポテンシャル $\mathbf{A}$，ϕ 中の粒子の運動の振幅が経路積分で表されない場合でもこれは正しい定式化である．たとえば，スピンをもつ相対論的粒子(Dirac 方程式で記述される粒子)に対して，$T[\mathbf{A},\phi]$ を適当な作用に基づく簡単な経路積分で表すことができない．しかしながら，他の方法，たとえば Dirac 方程式によって $T[\mathbf{A},\phi]$ を計算することが可能である．この汎関数の形が導かれると，原理的に (9-104) により振幅 K が求められる．

量子電気力学 の法則を (9-104) の形に述べる際に，電磁場の振る舞いをその作用を受けている粒子（または粒子系）の振る舞いから分離した．そのような分離ができるということは重要な結果である．たとえば，汎関数 $T[\mathbf{A},\phi]$ は性質が完全にわかっていない原子核の振る舞いを表す場合もある．しかしながら，外場の中での原子核の振る舞いをのみ知っていれば，原子核を含む量子電気力学の問題を解くことができる．

もちろん，(9-104) を厳密に用いるためには，すべての $\mathbf{A}$，ϕ について T が $\mathbf{A}$，ϕ の汎関数としてわかっていなければならない．しかし，それだけの情報が得られることはまれである．もしそれが得られたとしても $\mathbf{A}$，ϕ についての経路積分は容易でない．しかし，実際上この式は非常に有用である．T は，しばしば (9-99) のような形の $\mathbf{A}$，ϕ について線形な関数の指数関数で近似される．このとき，(9-100) と (9-101) の一般公式から，直接結果が得られる．もっと多くの場合，T はいろい

ろな ρ, $\mathbf{j}$ についての指数関数の和あるいは積分によって表される．そうすると (9-104) の結果は $e^{(i/\hbar)J}$ を含む式の和あるいは積分に対応する．ここで J は (9-101) で与えられ，ρ, $\mathbf{j}$ の関数である．

ほとんどの実際的な状況では，T は $\mathbf{A}$, ϕ についてのべき級数として表される．初めの数項は $\mathbf{A}$, ϕ を小さい摂動とする物質の理論より得られる．それを (9-104) に代入し $\mathbf{A}$, ϕ について積分すると，K に対する摂動展開（$e^2/\hbar c$ のべき）が得られる．

$$\int \mathcal{D}\mathbf{A}\int\mathcal{D}\phi\, A_i(\mathbf{R}_1, t_1)A_j(\mathbf{R}_2, t_2)\exp\left[\frac{i}{\hbar}S_3(\mathbf{A}, \phi)\right]$$
$$=2\hbar\delta_+[(t_1-t_2)^2c^2-|\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2|^2]$$

のような経路積分が必要となるが，それらは (9-100) と (9-101) の一般公式の両辺を ρ, $\mathbf{j}$ のべきで展開し対応する項を比較することにより得られる．ここで，この問題について深入りすることを止めるが，読者は次の文献を参照されたい．

R.P. Feynman, Mathematical Formulation of the Quantum Theory of Electromagnetic Interaction, *Phys. Rev.* **80** 440 (1950)の第8節．

第10章　統計力学

これまで系がある状態から他の状態に遷移することを議論してきた．大部分の物理的に現実的な状況では，初期状態を完全に決定できない．系はそれぞれ異なる確率でいろいろな状態に存在しうる．この場合，終状態も同様に不確かである．それぞれの確率をもってさまざまな初期状態から出発した結果，いろいろな終状態がありうるからである．われわれもただ1つの終状態に行く確率に興味があるのではなく，そのような状態のうちのどれか1つに到達する確率に興味がある．

状態の統計的不確定性の特に興味ある場合は，ある温度 T での熱平衡に対応する場合である．熱平衡における量子力学系はどれかのエネルギー準位にある．量子統計力学の結果によると，系がエネルギー E の状態に存在する確率は $e^{-E/kT}$ に比例する．ここで kT は自然エネルギー単位における温度である（変換因子 k は Boltzmann の定数と呼ばれ，1.38047×10^{-16} erg/°C，1eV/11.606°K）．

本書でこの指数分布則を導いたり議論したりはしない．エネルギー E は系全体のエネルギーであることを強調しておく．エネルギー準位が縮退している場合，その特定の準位にある状態はそれぞれ等確率をもつ．系が特別のエネルギー値をもつ全確率は縮退準位の状態数に対応する因子だけ大きくなる．

上に与えられた指数法則はまだ真の確率分布ではない．なぜならまだ規格化されていないからである．規格化因子は $1/Z$ と表される．こうすると，系がエネルギー E_i の状態（ここでは縮退がないものとする）にある確率は

$$p_i=\frac{1}{Z}e^{-E_i\beta} \tag{10-1}$$

となる．ここで $\beta=1/kT$ である．これより

$$Z=\sum_i e^{-E_i\beta} \tag{10-2}$$

規格化はあるエネルギー量 F を次のように定義することによって表すこともできる．

$$p_i=e^{-\beta(E_i-F)} \tag{10-3}$$

F は **Helmholtz の自由エネルギー**と呼ばれる．もちろん，エネルギー準位 E_i は T によらないが F は温度 T による．明らかに

$$Z = e^{-\beta F} \tag{10-4}$$

である．

10-1 分配関数

熱平衡にある系の物理的性質は，指数分布関数から導かれる．A はある性質を表す量とし，i 番目の状態における平均値が

$$A_i = \int dV\ \phi_i^* A \phi_i \tag{10-5}$$

であるとする．ここで積分は系の体積 V についてとる．このとき，系全体に対する A の統計平均は

$$\bar{A} = \sum p_i A_i = \frac{1}{Z} \sum A_i e^{-E_i \beta} \tag{10-6}$$

である．

たとえば，エネルギーの平均値あるいは期待値は，

$$\begin{aligned} U &= \sum p_i E_i = \frac{1}{Z} \sum E_i e^{-\beta E_i} \\ &= \sum E_i e^{-\beta(E_i - F)} \end{aligned} \tag{10-7}$$

となる．

規格化定数 Z が温度の関数として知られていると，(10-7) の和は容易に評価できる．(10-2) より，次の式が得られる．

$$\sum E_i e^{-\beta E_i} = -\frac{\partial Z}{\partial \beta} = kT^2 \frac{\partial Z}{\partial T} \tag{10-8}$$

これより

$$\begin{aligned} U &= \frac{kT^2}{Z} \frac{\partial Z}{\partial T} = kT^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T} = F - T\frac{\partial F}{\partial T} \\ &= \frac{\partial}{\partial \beta}(\beta F) \end{aligned} \tag{10-9}$$

となる．

温度についての微分を偏微分で表したのは，エネルギー準位を決める他の変数（系の体積，外場）がすべて固定されているからである．

体積など他の変数が変化したとき，エネルギーの期待値がどうなるかを見ること

は興味あることである．系がある特定の状態 E_i にあるものとする．あるパラメーター α の値をわずかに変化させてみる．１次摂動の原理を用いて，エネルギーの１次の変化がハミルトニアンの１次の変化の期待値と等しいことがわかる．すなわち，

$$E_i+\Delta E_i=\int dV\ \phi_i^*(H+\Delta H)\phi_i$$

$$\Delta E_i=\int dV\ \phi_i^*\Delta H\phi_i \tag{10-10}$$

古典物理学の言葉を使えば，比 $\Delta H/\Delta\alpha$ はパラメーター α に付随する「力」である，ということになる．このパラメーターが体積の場合，力は圧力に負号をつけたものである．すなわち，力の概念を次の式で定義する．

(力)×(パラメーターの変化)＝(エネルギーの変化)

$$f_\alpha=\frac{\partial H}{\partial\alpha} \tag{10-11}$$

例として，P＝圧力，V＝体積，とすると，

$$-P\Delta V=\Delta E \tag{10-12}$$

力の期待値を

$$\begin{aligned}\bar{f}_\alpha&=\overline{\left(\frac{\partial H}{\partial\alpha}\right)}=\sum p_i\left(\frac{\partial H}{\partial\alpha}\right)_i\\&=\sum p_i\frac{\partial E_i}{\partial\alpha}=\sum\frac{1}{Z}\frac{\partial E_i}{\partial\alpha}e^{-E_i/kT}=-\frac{kT}{Z}\frac{\partial}{\partial\alpha}(\sum e^{-E_i/kT})=-\frac{kT}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\alpha}\end{aligned} \tag{10-13}$$

と書くと，

$$\bar{f}_\alpha=-\frac{1}{\beta}\frac{\partial\ln Z}{\partial\alpha} \tag{10-14}$$

が得られる．ここで β と他のパラメーターは一定に保たれている．(10-4)を用いると，これを次のように書くことができる．

$$\bar{f}_\alpha=\frac{\partial F}{\partial\alpha} \tag{10-15}$$

パラメーター α が体積 V ならば，　$-f_\alpha$ は圧力 P であり，

$$P=-\frac{\partial F}{\partial V} \tag{10-16}$$

が得られる．

一定温度の系の体積が無限小だけ変化したとき，２つのことが同時に起こる．１つはエネルギー準位がそれぞれわずかだけずれることである．もう１つは一定の温度 T（たとえば，熱浴によって維持されている）で系が平衡状態に留まるために

は，それぞれのエネルギー準位に付随する確率がわずかに変化する（なぜなら，準位のエネルギーが変化するから）．準位のエネルギーだけが変化するのであるならば，系の全エネルギーの変化はこの変化をすべての準位について平均したものに対応する．前の議論より，これは圧力に体積変化を掛けたものである．しかしながら，温度を固定しておくには，状態占有数の再調整が必要である．よって全エネルギーはさらに変化しなければならない．この変化分を dQ と呼ぶ．この付加エネルギーは温度を維持している外系（熱浴）に取り込まれる．これを交換された熱と呼ぶ．よって

$$dU = -PdV + dQ \tag{10-17}$$

(10-7)に与えられている U の式から dQ を容易に求めることができる．V が dV だけ変化すると，それぞれのエネルギー準位 E_i は dE_i だけ変化する．Helmholtz の自由エネルギーは dF だけ変化する．よって全エネルギーは

$$dU = \sum dE_i e^{-\beta(E_i-F)} + \beta dF \sum E_i e^{-\beta(E_i-F)} - \beta \sum E_i dE_i e^{-\beta(E_i-F)} \tag{10-18}$$

だけ変化する．この式の第1項は dE_i の期待値であり，すでに説明したようにこれは $-PdV$ である．残りの2項は dQ となる．これらの2項は (10-2) の状態和の導関数によっても表され，結局 F の導関数として表される．実際，

$$dQ = T\frac{\partial^2 F}{\partial T \partial V}dV \tag{10-19}$$

が得られる．これが正しいことは（10-17）からもわかる．すなわち，

$$\frac{dQ}{dV} = \frac{\partial U}{\partial V} + P = \frac{\partial}{\partial V}\left(F - T\frac{\partial F}{\partial T}\right) - \frac{\partial F}{\partial V} = -T\frac{\partial^2 F}{\partial T \partial V} \tag{10-20}$$

（10-19）は温度を一定に保ちながら体積を dV だけ変えるときに交換される熱 dQ である．他のいずれかのパラメーターを変化させる場合でも似たような結果が得られる．たとえば，体積 V を一定に保ちながら温度 T を変化させると，交換される熱は全エネルギーの変化分と等しい．すなわち，

$$\Delta Q = \frac{\partial U}{\partial T}\Delta T = \frac{\partial}{\partial T}\left(F - T\frac{\partial F}{\partial T}\right)\Delta T = -T\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}\Delta T \tag{10-21}$$

一般に次の結果が得られる．

$$\Delta Q = -T\left(\frac{\partial^2 F}{\partial T \partial V}\Delta V + \frac{\partial^2 F}{\partial T \partial \alpha}\Delta \alpha + \frac{\partial^2 F}{\partial T^2}\Delta T\right) \tag{10-22}$$

（10-22）の右辺はエントロピーと呼ばれる量 $S = -(\partial F/\partial T)$ の全変化に T を掛けた形をしている．すなわち，

$$\Delta Q = T\Delta S \tag{10-23}$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} \tag{10-24}$$

$$U = F - TS \tag{10-25}$$

分配関数 Z と呼ばれる1つの関数が温度，体積，外場，などの関数として知られているならば，内部エネルギー，エントロピー，圧力など標準的な熱力学量が求められる．熱力学量は単純に Z（あるいは自由エネルギー）を微分することにより得られる．

ある物理量を決めることは，熱平衡にある系の場合でさえも，状態関数だけでなくもっと多くの情報を必要とする．たとえば，系が配位空間にあってその座標を x とする．次のような問いを考える．系を位置 x に見出す確率はいくらか．系が波動関数 $\phi_i(x)$ で定義される1つの状態にあるとき，x を観測する確率は波動関数の絶対値の2乗 $\phi_i^*(x)\phi_i(x)$ であることをわれわれは知っている．よってすべての可能な状態について平均すると，x を観測する確率は

$$P(x) = \frac{1}{Z}\sum_i \phi_i^*(x)\phi_i(x)e^{-\beta E_i} \tag{10-26}$$

となる．一般の場合，任意の量 A に興味がある場合には，期待値は次の式で与えられる．

$$\bar{A} = \frac{1}{Z}\sum_i A_i e^{-\beta E_i} = \frac{1}{Z}\sum_i e^{-\beta E_i}\int dx\ \phi_i^*(x)A\phi_i(x) \tag{10-27}$$

すべてこのような量の期待値は関数

$$\rho(x', x) = \sum_i \phi_i(x')\phi_i^*(x)e^{-\beta E_i} \tag{10-28}$$

が知られていると求められる．(10-27)の積分に現れる関数 A は式の中の ϕ_i にのみ作用し ϕ_i^* には作用しない演算子であるから，$\rho(x', x)$ だけで十分である．量 $\rho(x', x)$ を用いる際，A は x' にのみ作用するものと考え，その後で $A\rho(x', x)$ において x' を x に等しくする．最後にすべての x の値について積分する．この操作は $A\rho$ の**トレース**を求めるという．

$\rho(x', x)$ の定義より

$$P(x) = \frac{1}{Z}\rho(x, x) \tag{10-29}$$

となることは明らかである．確率 $P(x)$ は x について積分したときに1となるように規格化されているから，

$$Z=\int dx\ \rho(x,x)=\mathrm{Tr}[\rho] \qquad (10\text{-}30)$$

が得られる．ここで Tr は「トレース」の略号である．$\rho(x',x)$ は**密度行列**と呼ばれる．［もっと正確には温度 T に対する統計的密度行列と呼ばれる．密度行列という言葉は平衡系，非平衡系を問わず一般の系についても広く使われているが，通常，関数 $\rho(x',x)$ の規格化されたものについて使われる．すなわち，$\rho(x',x)/Z$ と表される関数について使われる.］統計力学の一般的問題は（10-28）を評価して密度行列を求めることである．通常の熱力学変数のみに関心があるならば，密度行列のトレース（対角和）だけが必要である．これから，分配関数 Z が得られる．

10-2　経路積分の評価

（10-28）で与えられている密度行列の定式化は，第4章で導かれて（4-59）に与えられている核の一般式

$$K(x_2,t_2;x_1,t_1)=\sum_j \phi_j(x_2)\phi_j^*(x_1)e^{-(i/\hbar)E_j(t_2-t_1)} \qquad (10\text{-}31)$$

と似ている．この式が使えるのはハミルトニアンが時間によらず一定であり，また $t_2>t_1$ である状況においてだけである．しかしながら，この状況は統計力学において仮定されている．なぜなら，ハミルトニアンが時間的に一定の場合にのみ，平衡に到達できるからである．（10-31）の形と（10-28）の形との間の相異は指数部分の変数である．（10-31）の時間差 t_2-t_1 を $-i\beta\hbar$ で置き換えると，密度行列の式は虚数の負の時間間隔に対応する核と形式的に等しいということがわかる．

これら2つの式の相似性を別の観点から展開することもできる．密度行列が核のように見えるような方法で書いてみることにしよう．$\rho(x_2,x_1)$ に対応して核

$$k(x_2,u_2;x_1,u_1)=\sum_i \phi_i(x_2)\phi_i^*(x_1)e^{-[(u_2-u_1)/\hbar]E_i} \qquad (10\text{-}32)$$

を定義する．このとき，$x_2=x'$，$x_1=x$，$u_2=\hbar\beta$，$u_1=0$ ならば，(10-32) は (10-28) と同じになる．

k を u_2 について偏微分すると，

$$-\hbar\frac{\partial k}{\partial u_2}=\sum_i E_i\phi_i(x_2)\phi_i^*(x_1)e^{-[(u_2-u_1)/\hbar]E_i} \qquad (10\text{-}33)$$

が得られる．しかし，ここで $E_i\phi_i(x')=H\phi_i(x')$ を思い起こそう．H_2 は変数 x_2 のみに対する演算であると了解すれば，次のように書くことができる．

$$-\hbar\frac{\partial k(2,1)}{\partial u_2}=H_2k(2,1) \tag{10-34}$$

同じことを別の書き方で表すと，

$$-\frac{\partial\rho(2,1)}{\partial\beta}=H_2\rho(2,1) \tag{10-35}$$

となる．

ρ に対するこの微分方程式は核 K に対する Schrödinger 方程式と似ている．これについては第 4 章で述べ，(4-52) に与えられてある．これをここにふたたび書くと，

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial K(2,1)}{\partial t_2}=H_2K(2,1) \qquad [t_2>t_1] \tag{10-36}$$

第 4 章で核 $K(2,1)$ が (10-36) に対する Green 関数であることがわかった．同じ意味で密度行列 $\rho(2,1)$ は (10-35) に対する Green 関数である．

運動量と座標のみを含む簡単なハミルトニアンについて，核を経路積分で書くことができた．たとえば，ハミルトニアンが

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x) \tag{10-37}$$

で与えられるならば，非常に短い時間間隔 $t_2-t_1=\varepsilon$ に対する核は，

$$K(2,1)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}}\exp\left[\frac{im}{2\hbar}\frac{(x_2-x_1)^2}{\varepsilon}-\frac{i}{\hbar}\varepsilon V\left(\frac{x_2+x_1}{2}\right)\right] \tag{10-38}$$

である．これは (10-37) に直接代入することにより確かめられる．(10-38) の形の多くの核の積を構成し，時間間隔 ε が 0 となり積の中の項の数が無限大となる極限をとることにより，有限の時間について核を記述する経路積分が導かれる．同様にして (10-34) の解を導くことができる．無限小区間 $u_2-u_1=\eta$ に対する解は $\varepsilon=-i\eta$ を (10-38) に代入することにより得られる．よって

$$k(x_2,\eta\,;\,x_1,0)=\sqrt{\frac{m}{2\pi\eta\hbar}}\exp\left\{-\frac{(m/2\eta)(x_2-x_1)^2+\eta V[(x_2+x_1)/2]}{\hbar}\right\} \tag{10-39}$$

これが (10-34) の正しい解であることは (10-39) を (10-34) に直接代入することにより示される．

次々に続いている u について定義される関数の組み合わせの規則は，次々に続いている時間間隔に対する核の組み合わせの規則と同じである．すなわち，

$$k(2,1)=\int dx_3\,k(2,3)k(3,1) \tag{10-40}$$

この結果が正しいことは (10-33) が u の 1 階導関数であるという事実から示され

る．この規則を用いて $k(2,1)$ を定義する経路積分を求めることができる．

$$k(x_2, u_2\,;\,x_1, u_1)$$
$$=\int\cdots\int\prod_{i=1}^{N-1}\frac{dx_i}{a}\exp\left\{-\sum_{i=1}^{N-1}\left[\frac{m}{2\hbar\eta}(x_{i+1}-x_i)^2+\frac{\eta}{\hbar}V\left(\frac{x_{i+1}+x_i}{2}\right)\right]\right\} \qquad (10\text{-}41)$$

規格化定数 a は

$$a=\sqrt{\frac{2\pi\hbar\eta}{m}} \qquad (10\text{-}42)$$

となり積分は区間 $u_2-u_1=N\eta$ において x_1 から x_2 に到るすべての経路について行う．

この導出の結果，「経路」$x(u)$ をパラメーター u によって座標を与える関数と考え，その導関数 dx/du を $\dot{x}$ と表すとき，

$$\rho(x_2, x_1)=\int\mathcal{D}x(u)\exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar}\left[\frac{m}{2}\dot{x}^2(u)+V(x)\right]\right\} \qquad (10\text{-}43)$$

となることがわかる．

これは大変おもしろい結果である．なぜなら，量子力学に特徴的に常に現れてくる i がここでは現れずに，量子力学的系の統計的振る舞いを経路積分で完全に表すからである(ただし,磁場の中を運動する系についてはこれは成り立たない).(10-43) の経路積分はこれまで述べてきた複素積分よりずっと扱いやすく，また見通しがよい．ここではなぜ積分に対する寄与の少ない経路があるのかがわかりやすい．なぜなら，指数が非常に大きくなる経路については，被積分関数が無視できるほどに小さくなるからである．さらに，近接する経路が互いの寄与を打ち消し合うかどうかを考察する必要がないのである．なぜなら，今の場合，すべての寄与は加算されるのであり，大きく寄与する経路と寄与の小さい経路とがあるというだけのことである．

パラメーター u はいかなる意味においても実際の時間ではない．密度行列 ρ の式におけるパラメーターにすぎない．しかしながら，考え方の類似性を使おうとすると，u をある経路に対する時間とみなすことができる．そしてそうすることにより (10-43) で与えられる結果を鮮明に見やすい形に表すことができる．われわれが行っていることは数学的式の物理学的類推を与えることである．u を「時間」と呼ぶことにする．括弧を付けておいたのはそれが実際の時間でないことを想起させるためである（とは言うものの，u は時間の次元をもつ)．同様に $\dot{x}$ は「速度」と呼ばれ，$m\dot{x}^2/2$ は「運動エネルギー」と呼ばれる．(10-43) の意味するところは，温度

$1/\beta$ に対する密度行列が次のようにして求められることである：

系が「時間」$\beta\hbar$ の間に初期配置と終配置の間を移動するあらゆる可能な経路すなわち，「運動」を考えよう．密度行列 ρ はそれぞれの運動の寄与の和である．ある特定の運動の寄与は問題の経路の「エネルギー」の「時間」積分を $\hbar$ で割ったものである．

分配関数を導くには終配置が初期配置に等しい場合のみを考えればよい．そしてあらゆる可能な初期配置について和をとる．

問題10-1　調和振動子からなる系の密度行列に対する式は

$$\rho(x', x) = \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sinh \omega\beta\hbar}\right)^{1/2} \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar(\sinh \omega\beta\hbar)^2} \times [(x^2 + x'^2)\cosh \omega\beta\hbar - 2xx']\right\} \tag{10-44}$$

であることを示せ．この答えは問題3-8の結果と比較できる．また自由エネルギーは $kT\ln[2\sinh(\hbar\omega/2kT)]$ であることを示せ．(10-2) の和を直接評価することによりこの値を確かめよ．

温度が低すぎない場合は（低すぎないとはどの程度の低温のことか，については後に本章で議論する）$\beta\hbar$ は非常に小さい．よって $x_1 = x_2$ とおいて分配関数を計算する際に，それぞれの経路は x_1 を出発してから非常に短い「時間」で x_1 に戻る．実際，経路は x_1 から遠いところで動き回っていることができない．なぜなら，遠くを動いていてまた短い「時間」で戻ってくるには高い「エネルギー」を必要とするからである．そのような経路について (10-43) に現れる指数関数は無視できるほどに小さくなるので，すべての経路についての和においてその寄与は無視できる．このような状況で $V[x(u)]$ を評価する際に考慮すべき経路 $x(u)$ は，初期位置 x_1 からあまり遠くまで動かない経路である．よって，1次近似で，すべての経路について $V[x(u)] \sim V[x_1]$ と書くことができる．この近似では，ポテンシャルエネルギーは経路によらず，ポテンシャルによる指数関数を積分の外に取り出すことができる．よってあまり低くない温度では，

$$\rho(x_1, x_1) = e^{-\beta V(x_1)} \int_{x_1}^{x_1} \mathcal{D}x(u) \exp\left[-\frac{m}{2\hbar}\int_0^{\beta\hbar} du\, \dot{x}^2(u)\right] \tag{10-45}$$

が得られる．

この最後の式で経路積分は自由粒子の経路積分である．第 3 章において自由粒子の運動についての核を定義する経路積分を解いたときと同様にして，上式も解くことができる．その結果は次のようになる．

$$\int_{x_1}^{x_2}\mathscr{D}x(u)\exp\left[-\frac{m}{2\hbar}\int_0^{\beta\hbar}du\ \dot{x}^2(u)\right]=\sqrt{\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}}\exp\left[-\frac{mkT(x_2-x_1)^2}{2\hbar^2}\right] \quad (10\text{-}46)$$

分配関数にのみ関心があるならば，$x_2=x_1$ とおくと

$$\rho(x_1, x_1)=\sqrt{\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}}e^{-\beta V(x_1)} \quad (10\text{-}47)$$

が得られる．このとき，分配関数はこの式をあらゆる可能な初期配置 x_1 について積分したものである．よって

$$Z=\sqrt{\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}}\int dx_1 e^{-\beta V(x_1)} \quad (10\text{-}48)$$

これは古典力学の極限で正しい分配関数の公式である．これは，古典力学の結論として不確定な乗数を除いて Boltzmann によって初めて導かれたものである．もっと複雑な場合（たとえば，多変数の場合）でも，古典的分配関数は単に 2 つの因子の積である．第 1 はすべての粒子が自由であると考えて得られる経路積分である．第 2 は配置積分と呼ばれ，単に $e^{-\beta V}$ の積分である．ここで V は系のポテンシャルで系を記述する N 個の変数のすべてに依存する．たとえば，ポテンシャル $V(\mathbf{x}_1,\ \mathbf{x}_2,\ \cdots\mathbf{x}_N)$ で相互作用する N 個の粒子に対して（$\mathbf{x}_a$ は粒子 a の位置ベクトル），なすべき積分は

$$\int\cdots\int d^3\mathbf{x}_1 d^3\mathbf{x}_2\cdots d^3\mathbf{x}_N \exp[-\beta V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_N)]$$

である．

分配関数に対するこの単純な式は，系の粒子が「時間」$\beta\hbar$ 後に初期位置からあまり遠くに行かない場合に正しい近似である．近似が破れるまでに粒子が行くことのできる距離の上限は（10-46）によって評価できる．終位置が初期位置と

$$\Delta x=\frac{\hbar}{\sqrt{mkT}} \quad (10\text{-}49)$$

だけ異なる場合，（10-46）の指数関数は非常に小さくなる．このことから，初期位置と終位置から Δx 以上離れている点を通う経路は，(10-43)の経路積分にあまり寄与しない経路であると考えられる．x がこの程度の距離を動いてもポテンシャル $V(x)$ があまり変化しないならば，古典統計力学は正しい．

室温における典型的な固体液体（たとえば，原子質量が20程度）に対して Δx は 0.1 Å 程度であるが，原子間距離や原子間力の長さは 1－2 Å 程度である．よって 0.1 Å よりも大きな運動は密度行列に寄与せず，1－2 Å 程度の運動が起こるまでポテンシャル関数は変化しない．古典統計力学がそのような物質において適切であることは明らかである．

固体・液体・気体の間の不思議な相変化はすべて通常古典統計力学が成り立つ領域で起こる．これらすべての相変化過程の数学的解釈は，すべての原子の座標について $e^{-\beta V}$ の積分を求める問題に帰着する．現象のおもしろい多様性と奇妙さがただ 1 つの積分から出てくるということは一見して驚くべきことであるが，実際には積分は巨大な数の変数についての多変数積分であることがわかる．通常 1 変数かせいぜい数個の変数についての積分しか経験がないから，変数の数が無限大に近づくような場合にどうしてほとんど定性的に異なる状況が生じるのか想像がつかないのである．

固体，液体，気体の凝縮の理論における問題の魅力は，多重積分の振る舞いと同様に，単純な系の単純な記述が分子数の巨大性と結び付くと豊富な現象を示すということにある．いかにして系の間の協同がそのような結果に到るのかを見ることは想像力をかき立てるところである．これらの多くの協同効果に対して定性的説明は直ちに得られるが，定量的詳細の問題も理論物理学者にとって魅力あることである．

古典近似が成り立たなくなるところで起こる重要な統計的現象がある．この場合，変数の数が多いことは量子力学の概念的複雑さと一緒になってもっと大きな問題を提起する．

厳密にいうと，(10-48) は純粋に古典的な統計力学によって得られる情報よりもやや多くのものを含んでいる．積分の前の係数に h が現れていることからも明らかである．古典力学は分配関数を絶対的に決めることができず，未決定の定数因子を残す．よって分配関数の対数は付加定数を除いてのみ決まる．このことは，自由エネルギーの式に T に比例する項が現れること，すなわち，エントロピーに付加的定数が現れることを意味する．この定数は化学定数と呼ばれることがあり，量子力学的解が求められると完全に評価できる．

10-3 量子力学的効果

古典的方法が適当ではない場合があるということをすでに指摘した．このような場合，「経路」に沿っての運動から生じるポテンシャル関数の変化を含めなければならない．この節で，粒子の運動を考慮したときのポテンシャルの1次の効果を計算する．

密度行列の式(10-43)において $V(x)$ を定数 $V(x_1)$ で近似する代わりに，V を x_1 のまわりでテイラー展開してみることもできよう．しかしながら，展開を任意の経路について定義される平均位置

$$\bar{x}=\frac{1}{\beta\hbar}\int_0^{\beta\hbar}du\,x(u) \tag{10-50}$$

のまわりで展開すれば，もっと容易にかつより精度よく扱うことができるであろう．それぞれの経路を平均位置で特徴づけることができ，(10-48) で行ったように初期位置 x_1 について積分する代わりにすべての平均位置について積分することができる．このようにして，分配関数は

$$Z=\int d\bar{x}\int_{x_1}^{x_1}\mathscr{D}x(u)\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left\{\frac{m}{2}\int_0^{\beta\hbar}du\,\dot{x}^2+\int_0^{\beta\hbar}du\,V[x(u)]\right\}\right) \tag{10-51}$$

となる．この式において，経路は2つの条件を満たすように選ぶ．(1) (10-50) で与えられる $\bar{x}$ は固定する．(2)初期位置と終位置は同一である．(ここでは，あらゆる経路についての積分はあらゆる端点 x_1 についての積分を含むということを意味する．)

$\bar{x}$ のまわりでの $V(x)$ のテイラー展開を使うと，

$$\int_0^{\beta\hbar}du\,V[x(u)]=\beta\hbar\,V(\bar{x})+\int_0^{\beta\hbar}du[x(u)-\bar{x}]\,V'(\bar{x})$$
$$+\frac{1}{2}\int_0^{\beta\hbar}du[x(u)-\bar{x}]^2\,V''(\bar{x})+\cdots \tag{10-52}$$

が得られる．(10-50) により，この式の右辺の第2項は0である．よって平均値のまわりで展開することにより，0でない最初の補正項が2次の次数であるという式が得られるのである．この式を用い2次よりも高次の項を無視すると，分配関数に対して次式が得られる．

$$Z\simeq\int d\bar{x}\,e^{-\beta V(\bar{x})}\int_{x_1}^{x_1}\mathscr{D}x(u)\exp\left(-\int_0^{\beta\hbar}\frac{du}{\hbar}\left\{\frac{m}{2}\dot{x}^2+[x(u)-\bar{x}]^2\,V''(\bar{x})\right\}\right) \tag{10-53}$$

この式の中の経路積分は以前に経験したものとある特別な点で異なっている．積分すべき経路は (10-50) という拘束条件をもっており，この条件はここでの目的のためには単に

$$\int_0^{\beta\hbar} du(x-\bar{x})=0$$

と表される．経路の座標として $y=x-\bar{x}$ を代入すると，拘束条件は次の形になる．

$$\int_0^{\beta\hbar} du\ y=0$$

そして経路積分そのものは

$$\int_{x_1-\bar{x}}^{x_1-\bar{x}} \mathcal{D}y(u)\exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar} du\left[\frac{m}{2}\dot{y}^2+\frac{1}{2}y^2V''(0)\right]\right\} \tag{10-54}$$

となる．

この経路積分の被積分関数は調和振動子の場合と同じで振動数を $\omega^2=-V''(0)/m$ としたものになっている．

次のようにして拘束条件を経路積分に適用してみる．経路積分全体にデルタ関数 $\delta\left(\int_0^{\beta\hbar} du\ y\right)$ を掛ける．経路積分の中で δ 関数を扱うために，Fourier 変換で表す．

$$\delta(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\exp(ikx)$$

そして次のように書く．

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}\int_{x_1-\bar{x}}^{x_1-\bar{x}} \mathcal{D}y(u)\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar} du\left(\frac{m}{2}\dot{y}^2+\frac{1}{2}V''y^2-ik\hbar u\right)\right] \tag{10-55}$$

この形で，経路積分は (10-50) の拘束条件を含むので，求める解を得るために標準的な経路積分を用いて直接計算を進めることができる．経路積分の被積分関数は強制調和振動子の経路積分の形をしている．ここで m と V'' を虚数と解釈すればよい．しかしながら，V'' が小さい場合だけが興味あるのだから，V'' の 1 次の項だけを含める近似は計算の段階の都合のよいときにいつでも行うことができる．

問題10-2　第 3 章の方法特に (3-66) を使って，この経路積分を解け．この問題での興味ある経路は同じ初期点と終点をもつこと，ならびに経路積分が完了するためにはこの点のすべての値について積分することが必要であることに留意せよ．最後に，k のすべての値について積分を行い，次のような解を求めよ．

$$(\text{定数})\times\left[1-\frac{\beta^2\hbar^2}{24m}V''(\bar{x})\right] \qquad (V''\text{の1次まで}) \tag{10-56}$$

問題10-2で求められた解より導かれる分配関数は，最善の形として次のように表される（V'' の1次まで正しい）．

$$Z=\sqrt{\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}}\int d\bar{x}\ \exp\left\{-\beta\left[V(\bar{x})+\frac{\beta\hbar^2}{24m}V''(\bar{x})\right]\right\} \tag{10-57}$$

ここで未知の定数は（10-48）の古典的結果と比較することにより簡単に求められた．この結果より，分配関数は古典的仮定の下に導かれたものと同じ形をしていることがわかる．唯一の相違はポテンシャルに補正項が付加されたことである．この補正項 $(\beta\hbar^2/24m)V''(\bar{x})$ は Planck 定数を含んでいることからわかるように明らかに量子力学的性格のものである．

問題10-3　3次元を運動する多粒子（i 番目の粒子の質量を m_i とし，添え字 i で粒子を同定する）について，ポテンシャルの補正は

$$\frac{\beta\hbar^2}{24}\sum_i\frac{1}{m_i}\nabla_i^2 V \tag{10-58}$$

であることを示せ．

実際，この計算結果はあまり有用でない．多くの問題（たとえば，衝突する気体分子）では，短距離でポテンシャルは急激に増大し激しい反発力となる．このような場合，2次導関数は非常に大きくなる．そうでない場合は，この公式は有用である．この公式の利点は容易に次の次数の精度に拡張できることである．

問題10-4　分配関数の $\hbar^4$ の次数までの補正は次の因子を含むことを示せ．

$$\left\{1-\frac{\beta^2\hbar^2}{24m}V''(\bar{x})+\frac{7\beta^4\hbar^4}{8\times720m^2}[V''(\bar{x})]^2-\frac{\beta^3\hbar^3}{24\times48m^2}V'''(\bar{x})+\cdots\right\}$$

量子力学的効果が，（10-48）の古典公式のように分配関数を計算することにより，表現されることがわかった．ただし，正しいポテンシャルの代わりに，補正されたポテンシャル $V+\beta\hbar^2V''/24m$ を使うのである．これより示唆されることは，さらに先に行ってよりよい有効ポテンシャル $U(\bar{x})$ を求めることである．古典方程式（10-48）の真の V を $U(\bar{x})$ で置き換えると正しい量子力学的分配関数のよい近似となることが期待される．厳密な式

$$Z=\int d\bar{x}\ \exp[-\beta V(\bar{x})]\int \mathscr{D}x(u)\exp\left(-\frac{m}{2\hbar}\int_0^{\beta\hbar}du\ \dot{x}^2 -\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar}du\{V[x(u)]-V[\bar{x}]\}\right) \tag{10-59}$$

から出発しよう．この式の経路積分は，経路 $x(u)$ について関数 e^f を平均することを表しているものとみなすことができる．ここで f とは，

$$f=-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar}du\{V[x(u)]-V[\bar{x}]\} \tag{10-60}$$

である．平均操作は重み関数 $\exp\left[-\frac{m}{2\hbar}\int du\ \dot{x}^2\right]$ を用いて行う．指数関数の平均を平均の指数関数で置き換えると，

$$\langle e^f\rangle\to e^{\langle f\rangle} \tag{10-61}$$

となり，その誤差は f の 2 次であり，$\langle f\rangle^2$ と $\langle f^2\rangle$ の差の程度である．第11章でこの誤差の符号を決めるが，実際は左辺は右辺よりも大きいのである．

$\bar{x}$ のそれぞれの値に対して，f の平均値を求める．すなわち，

$$\langle f\rangle=-\frac{1}{\hbar}\int \mathscr{D}x(u)\exp\left(-\frac{m}{2\hbar}\int_0^{\beta\hbar}du\dot{x}^2\right)\int_0^{\beta\hbar}dt\{V[x(t)]-V[\bar{x}]\} \tag{10-62}$$

ここで，経路に対して出発点に戻るということと (10-50) で与えられる $\bar{x}$ の定義を満たすという 2 つの拘束条件をつける．この経路積分を求めるために，やや異なるが関連している経路積分

$$I(\bar{x})=\int dY\int \mathscr{D}y(u)\exp\left(-\frac{m}{2\hbar}\int_0^{\beta\hbar}du\dot{y}^2\right)\{V[\bar{x}+y(t)]-V[\bar{x}]\} \tag{10-63}$$

を定義する．ここで経路 $y(u)$ は次の制限に従う．

$$y(0)=y(\beta\hbar)=Y,\quad \int_0^{\beta\hbar}du\ y(u)=0 \tag{10-64}$$

この場合，$I(\bar{x})$ は t に依存しない．それを見るには，次のような議論を使う．積分の中の各々の経路の長さは有限でなく，実際は，図10-1のように周期が $\beta\hbar$ の周期的経路の一周期部分であるとする．そのようなすべての経路の中の 2 つの族を考える．図10-2に示すように，1 つは $y(t)$ であり，もう 1 つは $y(t_1+t)=y_1(t)$ である．第 1 の経路が $t=t_1$ でもつ値，すなわち，$y(t_1)$ は第 2 の経路が $t=0$ のときにもつ値である．すなわち，$y_1(0)=y(t_1)$．さらに，他の任意の点 t_i に対して $y_i(0)=y(t_i)$ となるような類似の関数 $y_i(t)$ も経路の族の中に含める．それらすべての経路は

$$\int_0^{\beta\hbar}du\ \dot{y}^2$$

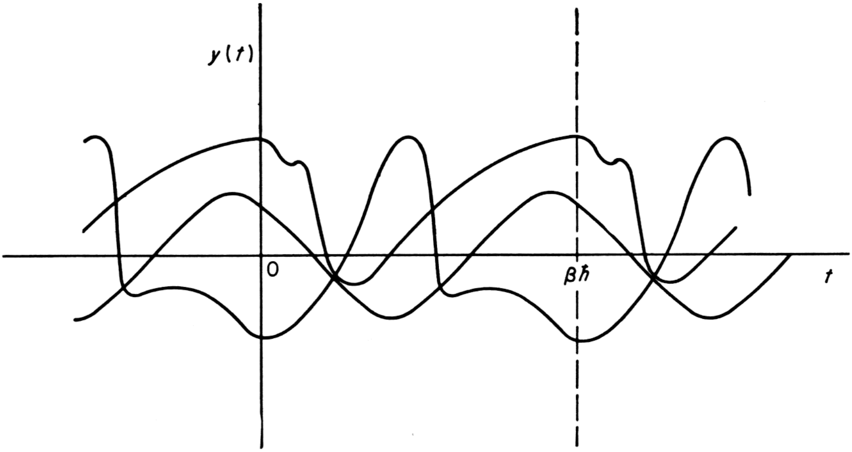


図10-1　$t=\beta\hbar$ で初期値（$t=0$ における値）に戻るすべての経路は，周期 $\beta\hbar$ の周期的経路の一部分（間隔 $\beta\hbar$）とみなすことができる．

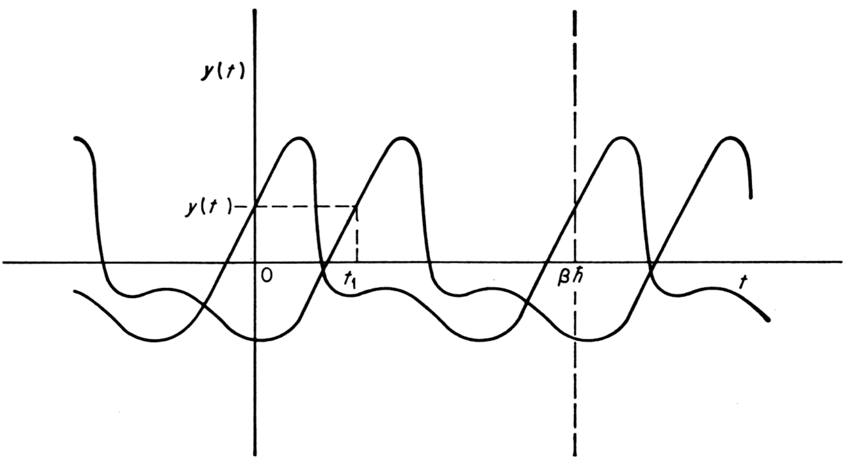


図10-2　図10-1に示したような「周期的」経路の 1 つ $y(t)$ が $t=t_1$ において値 $y(t_1)$ をもつとする．すべての「周期的」経路の集団の中には，この経路を距離 t_1 だけ左にずらしたもの $y(t+t_1)$ も含まれている．これは $t=0$ において $y(t_1)$ となる．このようなすべての経路について平均した経路積分は，t 軸において初めの点をどこに選ぶかに依存してはならない．

に対して同じ寄与を与える．もちろん，このことは経路積分に含まれている各々の経路に当てはまる．よってすべての経路 $y(u)$ についての経路積分において，任意に $t=0$ を設定しても何も一般性を失わないことがわかる．つまり，積分は t に依存しないということと同じである．

問題10-5　問題10-2で概要を示した方法を用いて，$\langle f\rangle$ と $I(\bar{x})$ が次のような関係をもっていることを示せ．

$$I(\bar{x})=\sqrt{\frac{12m}{2\pi\beta\hbar^2}}\int_{-\infty}^{\infty}dY\,[V(\bar{x}+Y)-V(\bar{x})]e^{-6Y^2m/\beta\hbar^2}=\frac{\langle f\rangle}{\beta} \tag{10-65}$$

分配関数に対するわれわれの近似を Z' と表し，それによる Helmholtz 自由エネルギーを F' と表す．つまり，$Z'=e^{-\beta F'}$．問題10-5の結果と（10-61）を使うと，

$$Z'=\int d\bar{x}\int\mathscr{D}x(u)\exp\{-\beta[V(\bar{x})+I(\bar{x})]\}\exp\left(-\frac{m}{2\hbar}\int_0^{\beta\hbar}du\,\dot{x}^2\right) \tag{10-66}$$

が得られる．

（10-66）に現れる経路積分は（10-46）で求めた積分である．よって次のように書くことができる．

$$e^{-\beta F'}=\sqrt{\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}}\int d\bar{x}\,e^{-\beta U(\bar{x})} \tag{10-67}$$

ここで

$$U(\bar{x})=\sqrt{\frac{12m}{2\pi\beta\hbar^2}}\int_{-\infty}^{\infty}dy\,V(\bar{x}+y)e^{-6y^2m/\beta\hbar^2} \tag{10-68}$$

であり，$V(\bar{x})$ の項は打ち消し合う．

これらの結果より，近似的自由エネルギー F' を古典的に計算でき［すなわち，（10-48）のような形を使って］，$V(\bar{x})$ の代わりに（10-68）で定義される有効ポテンシャル $U(x)$ を使うとよい近似が得られることがわかる．ついでに，有効ポテンシャルが温度依存していることに注意する．

有効ポテンシャルは $\bar{x}$ の近傍において $V(x)$ をガウス分布で平均したものである．ここで重みのガウス関数の拡がりの 2 乗平均（標準偏差）は $(\beta\hbar^2/12m)1/2$ である．さらにこの近似の中にあるさまざまな不等式を追って行くと，近似的自由エネルギーが真の自由エネルギーより大きいことがわかる．詳細は次の章で（11-9）以下で議論する．

問題10-6　V をテイラー級数に展開すると，(10-68) の関係式は (10-57) の正しいポテンシャル［すなわち，(10-57) の指数部分の関数］になることを示せ．

問題10-7　調和振動子に適用して近似の有効性を確かめよ．この場合，自由エネルギーの厳密な値は

$$F = kT\ln\left(2\sinh\frac{\hbar\omega}{2kT}\right) \tag{10-69}$$

である．近似ポテンシャル U により自由エネルギーの近似値 F' を求めよ．次の式を示せ．

$$U = \frac{m\omega^2}{2}\left(x^2 + \frac{\beta\hbar}{12m}\right) \tag{10-70}$$

$$F' = kT\left(\ln\frac{\hbar\omega}{kT}\right) + \frac{(\hbar\omega)^2}{24kT} \tag{10-71}$$

自由エネルギーあるいは，いろいろな振動数に対する自由エネルギーと kT との比を求めよ．比 $\hbar\omega/kT$ としてたとえば，1，2，4 という値を使ってみよ．予想していたように F' が F よりも大きいことを示せ．その差が温度の降下とともに大きくなることを示せ．古典的領域からかなり離れていても（たとえば，$\hbar\omega/kT=2$ のとき，系は確率85%で基底状態にある）近似の結果は驚くべきほどに真の結果に近い．

これらの結果を古典近似から得られる自由エネルギー $kT\ln(\hbar\omega/kT)$ と比較せよ．その結果，表に与えられているような $2F/\hbar\omega$ の値が示されるはずである．

$\hbar\omega/kT$	1	2	4
厳密解	0.08266	0.8546	0.9906
本節の近似	0.08333	0.8598	1.0264
古典解	0.00000	0.6931	0.6931

10-4　多変数の系

系が多変数をもつとき，それらを記述する公式は，対称性の考察から生じるいくつかの特殊な問題を除いて，これまで調べてきた方法を直接拡張することにより得られる．

液体ヘリウム　例として，液体ヘリウムの分配関数を求める問題を考えよう．N

個の同一の原子があり，それぞれの質量が m で，ある体積内に入っているものとする．さらに，原子は2体力ポテンシャル $V(r_{1,2})$ で相互作用しているものとする．このポテンシャルは遠方で弱い引力であるが近距離で非常に強い斥力である．考え方の方向を与えるために，$V(r)$ として剛体球間のポテンシャルを想起しよう．すなわち，

$$\begin{aligned} &V(r)=0 \qquad r>a \\ &V(r)=\infty \qquad r<a \qquad a=2.7\,\text{Å} \end{aligned} \tag{10-72}$$

このような系に対するラグランジアンは次の形をしている．

$$L=\sum_i \frac{1}{2}m|\dot{\mathbf{R}}_i|^2-\frac{1}{2}\sum_{i,j} V(r_{i,j}) \tag{10-73}$$

これより，分配関数が

$$\begin{aligned} Z=\int d^N\mathbf{R}(0)\int \mathscr{D}^N\mathbf{R}(t)\exp\biggl(-\biggl\{\frac{m}{2\hbar}\int_0^{\beta\hbar}dt\ |\dot{\mathbf{R}}(t)|^2 \\ +\frac{1}{2\hbar}\sum_{i,j}\int_0^{\beta\hbar}dtV[\mathbf{R}_i(t)-\mathbf{R}_j(t)]\biggr\}\biggr) \end{aligned} \tag{10-74}$$

となることがわかる．この最後の式で，記号 $d^N\mathbf{R}$ は $d^3\mathbf{R}_1d^3\mathbf{R}_2d^3\mathbf{R}_3\cdots d^3\mathbf{R}_N$ を表す．同様に，$\mathscr{D}^N\mathbf{R}$ は $\mathscr{D}\mathbf{R}_1\mathscr{D}\mathbf{R}_2\mathscr{D}\mathbf{R}_3\cdots\mathscr{D}\mathbf{R}_N$ を意味する．経路積分はすべて初期点 $\mathbf{R}_i(0)$ と終点 $\mathbf{R}_i(\beta\hbar)$の間で行い，$\mathbf{R}_i(0)=\mathbf{R}_i(\beta\hbar)$を満たすようにする．

(10-74) に書いた形は実際正しくない．上に触れた対称性の問題がこの結果に影響する．この特徴は同一粒子の量子力学のおもしろい側面である．第1章で述べたことであるが，1つの事象が2つの分別不可能な方法で起こった場合，2つの方法の振幅は足し合わされる．特に，分別不可能な粒子を扱う場合，どんな事象でもそれを実現する別の方法が常に存在する．すなわち，2つの粒子の交換である．その場合，粒子が交換された場合の振幅と交換されていない場合の振幅とは足し合わされる(この加法則は Bose 粒子に有効である．Fermi 粒子に対しては粒子の奇置換によって生じる振幅の寄与は互いに異符号となる)．通常のヘリウム原子は質量4で6個の粒子を含む．2個の陽子，2個の中性子，2個の電子である．これより，ヘリウム原子が Bose 粒子であって，粒子の置換の振幅は足し合わされることがわかる(たとえば，Bose 粒子は対称統計に従い，Fermi 粒子は反対称統計に従うという)．

この振幅の相加性がいかにして導かれるかを少なくともヘリウムについて見るために，この議論の方向に従っていくことにしよう．終状態で原子は互いに分別され

ない．よって終状態の原子の配置の様子が初期状態と同じようであっても，いくつかの原子の個別性が交換されているかも知れないのである．

たとえば，1という記号をつけた原子が位置 $x_1(0)$ から出発するとする．最終的に少なくともある原子がこの同じ位置にあるものとする．よってある原子に対して，$x(\beta\hbar)=x_1(0)$ である．しかしながら，この特別の位置にやってくるのは必ずしも原子1であるとは限らない．代わりに，原子1が原子2の初期位置，$x_2(0)$ に行き，原子2が原子1の初期位置に行くかも知れない．すなわち，最終状態で原子1と2が場所を交換することが可能である．

この状況をもっとも一般的な表現で表すために，Px_i が初めに x_i にあった原子の置換を表すものとしよう．たとえば，原子1と2が交換され他のすべての原子はそのままであるという状況では，次のようになる．

$$Px_1=x_2 \qquad Px_2=x_1 \qquad Px_3=x_3 \quad \cdots \quad Px_N=x_N \quad \cdots \tag{10-75}$$

一般的に終状態は初期状態のいずれかの置換である．

$$x_j(\beta\hbar)=Px_i(0) \tag{10-76}$$

よって完全な振幅を構成するために，$N!$ 個のすべての置換について振幅の和をとらなければならない．なぜなら，それぞれの置換は別々の可能性であるからである．すべての置換について平均すると，規格化は正しい．これから導かれる対称統計の規則により，(10-74) は次式で置き換えられることになる．

$$Z=\frac{1}{N}\sum_P{}' \int d^N\mathbf{R}(0)\int_{\mathbf{R}(0)}^{P\mathbf{R}(0)} \mathscr{D}^N\mathbf{R}(t)\exp\biggl(-\frac{1}{2\hbar}\biggl\{m\sum_i\int_0^{\beta\hbar}dt\ |\dot{\mathbf{R}}_i|^2 + \frac{1}{2\hbar}\sum_{i,j}\int_0^{\beta\hbar}dtV[\mathbf{R}_i(t)-\mathbf{R}_j(t)]\biggr\}\biggr) \tag{10-77}$$

ここで $\sum_P{}'$ はすべての置換 P についての和を表す．

Fermi 粒子を扱う場合，たとえば，3個の核子をもつヘリウムの同位体の場合，さらに因子 ± 1 も考慮しなければならない．つまり，偶置換に対して正，奇置換に対して負である．われわれの結果には，さらに原子のスピンに依存する側面が現れる．

次のように (10-77) の導出をさらに詳しく与えることができる．ヘリウム4の原子に対して，2つの原子が位置 a と b から出発して位置 c と d に到る振幅は

$$K(c,a;d,b)+K(d,a;c,b) \tag{10-78}$$

である（別々の終条件の振幅は足し合わさる．なぜなら，これらの条件は分別でき

ないから)．この式で $K(c, a; d, b)$ はある粒子が a から c に行き他の粒子が b から d に行く振幅である．

粒子は分別不可能であるから，その対称性から 2 つの粒子を位置 c と d に見出す振幅は c，d の対称関数でなければならないことがわかる．すなわち，波動関数 $\psi(c, d)$ は変数 r_c，r_d の対称関数でなければならない．すなわち，

$$\psi(c, d) = \psi(d, c) \tag{10-79}$$

粒子が Fermi ならば，波動関数はこれらの位置の反対称関数でなければならない．

多粒子を問題とするとき，規則は単純に拡張される．すなわち，

$$\begin{aligned}\psi(1, 2, 3, \cdots, N) &= \psi(1, 3, 2, \cdots, N)\\ &= \psi(1, 2, 4, \cdots, N)\\ &= \cdots\end{aligned} \tag{10-80}$$

一般則をもっとも簡単に表せば，波動関数は対称的(Fermi 粒子の場合，反対称的)でなければならないということである．他の Schrödinger 方程式の解も存在するが，対称的と反対称的な解のみが自然界に現れる．よって (10-2) の分配関数を定義する和において，$H\phi_n = E_n\phi_n$ の解から得られるハミルトニアンのエネルギー固有値のすべてについて和をとるのでなく，波動関数 ϕ_n が対称関数であるものについてのみ和をとりたい．たとえば，密度行列 $\rho(x', x)$ は N 個の原子の統計性を無視して (10-28) で定義されている．どのようにしたら対称的波動関数のみを含むように和をとることが可能となるか．

このような和の逓減を行うために，次のような技巧を使う．まず，任意の関数より，その独立変数を置換して得られる関数を足し合わせることによって，対称関数をつくることができることに注意する．よって，任意の関数 $f(x_1, x_2)$ に対して結合 $f(x_1, x_2) + f(x_2, x_1)$ は対称関数である．任意の波動関数 $\phi_n(x_1, x_2, \cdots, x_N)$ に対して，関数

$$\phi'(x_i) = \sum_P \phi(Px_i) \tag{10-81}$$

は対称的である．$\phi_n(x_i)$ が Schrödinger 方程式の解であるならば，(10-81) で定義される $\phi'_n(x_i)$ もまた解である．なぜなら，ハミルトニアン H は座標の交換について対称であるから．したがって，それぞれの交換形 $\phi_n(Px)$ は解でありその和もまた解である．

エネルギー固有値 E_n のあるものは対称な固有関数 ϕ_n をもち，あるものはもたな

い．E_k が Schrödinger 方程式の非対称な解に対応するエネルギー固有値であるとする．このとき，和 $\sum \phi_k(Px)$ は 0 でなければならない．なぜなら，もし，0 でないならば，E_k に対する対称解であるからである．この結果より，(10-81) で定義される操作は波動方程式の解の中で対称なものだけを選び出す．他のすべての解は 0 となる．$\phi_n(x)$ が対称ならば，$\phi_n(Px)$ と等しい．N 個の原子を置換する仕方の数は $N!$ であるから，次の式が成り立つ．

$$\begin{aligned}\sum \phi_n(Px_i) &= N!\,\phi_n(x_i) \qquad [\phi_n \text{ が対称のとき}] \\ &= 0 \qquad [\phi_n \text{ が別の対称性をもつとき}]\end{aligned} \tag{10-82}$$

これらの結果がわれわれの問いに対する解となっている．密度行列を定義する和の中から対称状態に対応する特別の要素を選ぶことができる．よって

$$\begin{aligned}\sum_P \rho(Px', x) &= \sum_{\text{すべての状態 } n} \sum_P \phi_n(Px')\phi_n^*(x)e^{-\beta E_n} \\ &= N! \sum_{\text{対称状態 } n} \phi_n(x')\phi_n(x)e^{-\beta E_n} \\ &= N!\,\rho_{sym}(x', x)\end{aligned} \tag{10-83}$$

となる．これが，対称統計に対する分配関数を定義する (10-77) においてすべての粒子を置換し $N!$ で割る理由である．導かれた分配関数は

$$\int \rho_{sym}(x_0, x_0)d^N x_0 = Z_{sym} = \sum_{\text{対称状態 } n} e^{-\beta E_n} \tag{10-84}$$

に対応する．

(10-77) のいくつかの性質について注意しよう．高温では，分配関数に対して古典的解が予想され，これには量子力学的効果は現れない．ポテンシャルの効果を当面無視することにし，初期点から d だけ離れた点までの原子の運動の効果を考える．(10-77) の経路積分において，これは初期点 $\mathbf{R}_i(0)$ から置換された位置 $P\mathbf{R}_i(0)$ までの運動である．すべての置換についての和に対してこの特別の置換の与える寄与は $\exp(-md^2kT/2\hbar^2)$ に比例する．これは，温度の上昇および原子間の間隔の増大とともに減少する．よって原子が極端に近接していないならば，和の中の置換は（2 原子間のもっとも簡単な置換さえも），すべての原子をもとの位置のままにする恒等置換に較べて重要でない．液体ヘリウム中の原子の中心から半径2.7 Åのところで急激に増大するポテンシャルの効果を含めると，原子間距離がこれより小さいような配置は重要でない．

恒等置換のみが和に重要な寄与をするので，考慮すべきことは因子 $N!$ だけである．**古典的**熱力学の初期の頃は，この因子が同種粒子を扱うときに便利であると考

えられた．しかし，この意味ははっきりとは理解されなかった．異種原子の系を研究するとき，化学定数に対するこの因子の効果は**混合のエントロピー**と呼ばれる．

温度が低くなると，新しい終位置に移動することに対する抑制は段々小さくなる．よって極端に低温では置換に関する和の中で新しい項が重要となる．もちろん，量子的補正を入れなければならない．これは第1近似としてポテンシャル V を補正されたポテンシャル U で置き換えることにより含められる． 温度が低くなると液体ヘリウムの比熱は2.3～2.4 K の付近で少し上昇する．

問題10-8　液体ヘリウムの密度は0.17 g/cm³ である．液体ヘリウムの記述において摂動項が重要な役割を演じ始める温度の大きさの程度はいくらか．

一見したところ，非常に込み入った原子の交換は決して重要とならないと思われる．原子が近接する位置に動くたびに，間隔を含む指数因子を考慮しなければならない．この因子を y と表すことにすると，r 個の原子が近接する位置に動く場合に因子 y^r を考慮しなければならない．y は明らかにどんな温度でも1よりも小さいから大きい r に対して y^r は非常に小さくなる．r が1 cc の液体ヘリウムの中の原子数（近似的に 10^{22} の程度）になると，y^r のような因子の寄与は無限小となる．しかしながら，ここで見逃していることは，r 個の原子が置換すると可能な置換の数 $r!$ は莫大な数となるという事実である．よって，ある特別な置換の重みが小さいことは，置換数の大きいことで埋め合わせられる．

液体ヘリウムの記述で生じるもう1つの疑問は置換のタイプに関するものである．どんな置換もサイクルによって記述される．つまり，1-4，4-7，7-6，6-1はサイクルである．重要なのは長いサイクルか短いサイクルかである．注意深く調べてみると，中くらいの温度では単純な2原子交換が重要である．温度が低くなると，3原子のサイクルが重要となりさらに4原子と続く．しかし，突然ある臨界温度でもっと大きな長さ L のサイクルが y^L の小さい値を大きな数で埋め合わせる．この温度で重要なサイクルの長さは大変大きくなり，容器の中のすべての原子を含むほどに非常に長くなる．この点で温度に対する比熱の曲線は不連続性を示す．この温度以下では液体の振る舞いは非常に奇妙になる．非常に細い管を流れる際に，低い速度に対して抵抗なく流れる．液体全体の熱伝導率が無限大となる，等．これらの奇妙な振る舞いは量子力学の現れであり，特に，1つの原子をもう1つの原子で置き換える振

幅間の相加的干渉の効果である．ちょうど転移温度における比熱の振る舞いの詳細について，定量的には基礎があまりしっかりしていない．しかし，転移に対する定性的な理由ははっきりしている*)．

He^3 などの Fermi 粒子に対する (10-77) と類似の式もまた容易に書き下せる．しかしながら，液体 He^3 の場合，ポテンシャルの効果を定量的に正確に評価することは非常に困難である．その理由は置換についての和における 1 つのサイクルの寄与は，サイクルの長さ L の中に奇数個の原子が入るか偶数個の原子が入るかによって，正になったり負になったりする．低温では $L=51$ や $L=52$ のようなサイクルの寄与はほとんど等しいが符号が逆である．よってほとんど打ち消し合うのである．そのような項の間の差を計算する必要があり，そのためにはそれぞれの項を別々に非常に注意深く計算する必要がある．絶対値がゆっくりと減少する大きな項からなる交代級数で，それぞれの項に対する厳密な解析的表式が与えられていない場合，その級数の和をとることは非常に困難である．

Fermi 系を記述する数学を正の項の和に対応する方法でつくり直すことが可能であるならば，この問題において前進することができる．そのような理論の試みは行われたが，その結果現れる項は定性的に評価することもできないほどにむずかしい式である．

1Å程度の距離だけ離れている分子に対して，温度が絶対温度で数度まで下がったときのみ，交換（非恒等的置換）の効果が重要であることを見てきた．これと対比して，金属固体における電子の振る舞いを考えよう．電子の質量は分子の質量よりもずっと小さいので，臨界温度はもっと高くなる．室温で，金属中の電子はこれらのサイクル置換の交換効果を含む式だけで正しく記述される．この観点から，室温は電子にとって非常に寒いということになる．交換効果が圧倒的に重要である．言い方を換えると，電子気体は縮退している．もちろん，電子は Coulomb の法則によって相互作用をしておりこれは極めて強い．しかし，Coulomb 力の効果は長距離であり，その効果は平均化される．それぞれの電子は，原子核の配置と近接する電子の位置の平均によって生じる同じ周期的ポテンシャルの中を運動しているが，近似的にそれぞれの電子が独立粒子として振る舞うとしてもよい．相互作用を無視した

---

*) この観点からの液体ヘリウムの分配関数についての詳しい議論については R.P. Feynman, *Phys. Rev.* **91** (1953) 1291を見よ．

理想的 Fermi 気体の研究により，金属中の電子の振る舞いについて多くのことを学ぶことができる．

しかしながら，それで十分理解できたということでないことも明らかである．なぜなら，絶対温度で数度のところで起こる金属の超伝導は不可解のままであるからである．この現象には，少なくともある金属では，原子の遅い振動運動との相互作用が関与している．そう結論する理由は，同じ金属の 2 つの同位体に対する転移温度が原子質量に依存することである．もし転移が単に電子間の相互作用や**固定**した原子の理想的配列と電子との相互作用に関わっているのであれば，同位体質量は重要でないはずである．よって原子が固定されているという理想化は正しくない．しかし，原子の運動によって，ある金属で比熱の急な跳びが起こり電気伝導がこの転移温度以下で抵抗 0 となるのはなぜであろうか．この問題に対して Bardeen, Cooper, Schrieffer*) によって初めて満足ゆく解答が与えられた．経路積分の方法はかれらの解析で何ら役割を演じていない．実際，縮退した Fermi 系に対して経路積分の方法が有用であったことはかつてない．

Planck の黒体輻射の法則　相互作用している振動子からなる任意の系の分配関数は容易に求められる．このような系は振動数 ω_i の独立な振動子の系と等価である．しかしながら，独立な系からなる系の自由エネルギー F の値はそれぞれ別々の系の F の値の和である．それぞれは (10-2) の和より直接求められ，

$$kT\,\ln\left[2\sinh\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right)\right]$$

である．これより，調和振動子系の自由エネルギーが得られる．

$$\begin{aligned}F&=kT\sum_i \ln\left(2\sinh\frac{\hbar\omega_i}{kT}\right)\\&=kT\sum_i \ln(1-e^{-\hbar\omega_i/kT})+\sum_i\frac{\hbar\omega_i}{2}\end{aligned}\tag{10-85}$$

式の最後の項は系の基底状態のエネルギーである．

体積 V の箱の中の電磁場に対して，モードは波数ベクトル $\mathbf{K}$ で定義される．それぞれ $\mathbf{K}$ に対して 2 つのモードがある．零点エネルギーを省略すると，単位体積当たりの電磁場の自由エネルギーは

---

*)　J. Bardeen, L.N. Cooper and J.R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **106** (1957) 162；**108** (1957) 1175.

$$F = kT\int\frac{d^3\mathbf{K}}{(2\pi)^3}\,2\ln(1-e^{-\hbar Kc/kT}) \tag{10-86}$$

である．内部エネルギー U は βF を β について偏微分したものであり次のようになる（$\omega=Kc$ とおく）．

$$U = 2\int\frac{d^3\mathbf{K}}{(2\pi)^3}\,\hbar\omega\,\frac{1}{e^{\hbar\omega/kT}-1} \tag{10-87}$$

K 空間における体積要素は

$$d^3\mathbf{K} = 4\pi K^2 dK = 4\pi\frac{\omega^2}{c^3}d\omega \tag{10-88}$$

と書ける．これより ω から $\omega+d\omega$ までの振動数領域にある電磁場のエネルギーは

$$\frac{2\cdot 4\pi}{(2\pi c)^3}\,\frac{\hbar\omega d\omega}{e^{\hbar\omega/kT}-1} \tag{10-89}$$

であることがわかる．これはPlanckによって発見された有名な黒体輻射の法則である．これは最初に得られた実際の量子力学の結果であり，新しい物理法則の発見の第一歩であった．

初期の量子力学の大成功のもう 1 つの例はEinsteinとDebyeによる固体の比熱の温度依存性の説明であった．これも (10-85) からくるのであるが，振動子に当たるのが第 8 章で述べたような結晶の基準モードである．たとえば，そのような結晶の単位体積当たりの熱エネルギーは (10-87) のように（零点エネルギーを省略する），

$$U = \sum_{3p\text{ 個のモード}}\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\,\frac{\hbar\omega(\mathbf{k})}{\exp[\hbar\omega(\mathbf{k})/kT]-1} \tag{10-90}$$

となる．ここで $\omega(\mathbf{k})$ は波数 $\mathbf{k}$ のフォノンの振動数である．結晶中ではこれは多価関数である（単位胞に p 個の原子があるときそれぞれの $\mathbf{k}$ に対して $3p$ 個の ω の値をとる）．それぞれの $\mathbf{k}$ に対して可能な ω の値について和をとらなければならない．$\mathbf{k}$ についての積分は結晶に固有の有限な領域についてのみ行う．光についてはそれぞれの $\mathbf{k}$ に対して 2 つのモードがあり，それぞれ振動数 $\omega=ck$ をもつ．よって和は因子 2 を与え (10-87) が導かれる．$\mathbf{k}$ の積分は 0 から無限大までである．

(10-90) の結果はいろいろな近似でEinsteinとDebyeによって研究され比熱曲線の主要な特徴をよく説明する．特に古典論の予想とは矛盾した低温における振る舞いを説明した．今日では，フォノンスペクトルのもっと完全な知識を (10-90) に入れることにより，原子の内部振動による固体の比熱の部分について完全に満足で

きる記述がなされる.

10-5　導出方法に関する注意

この章の初めの部分において与えられた統計力学の表式はまだ解明すべきものを多く残している. 系がエネルギー状態 E にある確率が $e^{-E/kT}$ に比例することを示す基本法則は, 通常複雑な系の間の相互作用を長時間にわたって調べることにより導かれる. しかしおもしろい問題がある.

この本では第 2 章で示したように, 経路積分の技法を用いて量子力学の法則の定義から物理の議論を始めた. 好奇心をそそる問題として, これが基本法則であるという観点をとることにしよう. そうすると, 経路積分で定義されるような量子力学的性質をもつ系の統計的性質は究極的に分配関数 Z で表現される. (10-77) に示したように, 分配関数 Z も経路積分で表され, その形はもとの経路積分と非常に類似しまた密接に関連している. しかし, この結果を導くには, 波動関数, 定常状態と固有値の存在, 考えている長時間における相互作用についての議論などを認める必要がある. それらをすべて用いると分配関数を準位 E_i で表した式 (10-1) が得られる. 最後に, Z に対する経路積分の定式化を導く議論を逆にしてみる. 時間に依存する運動に対する経路積分の記述から直接に平衡系に対する Z の経路積分表示を導く方法はないだろうか. エネルギー準位を求めなくて済む近道はないだろうか. それが可能としても, どのようにしてよいかわからない.

とにかくやってみたらどうだ, という人がいるかも知れない. これは, 両手を後ろ手に縛って泳げ, というに等しい. 結局は, エネルギー準位がある, ということは周知の如くである. エネルギー準位のことに触れないようにすることの唯一の言い訳は, そうすれば物理過程の深い理解が得られるのではないかという期待であり, またおそらくもっと強力な統計力学の方法の出発点となるのではないかという期待である. とにかく, この問題を解決することは興味あることである*).

系の最低のエネルギー準位を経路積分から直接計算する (Schrödinger 方程式によって間接的に計算するのではなく) ためのよく知られた変分原理を求めることは同様の追求を励ますものである. この変分原理は第11章で述べる方法を与える. よって, この一見アカデミックな問題は多少有用であるしまた多少興味あることでも

---

*)　最近の確率量子化の方法は, 1つの方向である.

ある．

しかしながら，1つの特殊な解法を求める動機は，古典物理学の方法論におけるアカデミックな興味によって単純に触発されていると考えられる．最小作用の原理に従う系があって，その作用が次式で定義されているものとする．

$$S=\frac{1}{2}\int dt\ m\dot{x}^2+\frac{k}{2}\int dt\ x(t)x(t+a) \tag{10-91}$$

このとき，運動方程式は

$$m\ddot{x}=\frac{k}{2}[x(t+a)+x(t-a)] \tag{10-92}$$

となる．これは奇妙な状況である．というのは，粒子に働く力が過去と未来の座標の平均値に依存するからである．(10-92) には指数的に発散する解があるが，遠い過去と遠い未来において x が有限に留まる運動のみが許されるものとしよう（ちなみに，作用法則が $t\to\pm\infty$ に対して $\delta x=0$ となるという条件に従って経路のすべての変分に対して $\delta S=0$ であるならば，無視する解はいずれにせよ除外されることは確かである)．

このような系に対して，保存するエネルギーの式を定義することができる．なぜなら，系の運動方程式は時間によらないからである（簡単なハミルトニアンからはこの運動方程式は導かれない)．おそらく，このような系は，たとえば，気体の分子に攪乱されて熱平衡に達するという性質をもつであろう．次のような疑問が生じるかも知れない．ある系が (10-92) の運動方程式と無限遠における境界条件［系が温度 T の平衡状態にある］に従うとき，その系を記述するさまざまな物理量の平均値はなにか．おそらく，このような問題は定義不可能かも知れない．また，運動方程式が線形であるためこの特別の場合だけ容易に解けるのかも知れない．いずれにせよ，以上のことを指摘した目的は，ハミルトニアンと運動量変数の存在が古典統計力学の定式化に実際，必要であるかどうかを問うことである．すなわち，もっと広い種類の力学系が解析可能かどうかを問うことである．たとえ作用が系の粒子の瞬間の位置と速度以外の変数を含むとしても，運動方程式が最小作用の原理で極く単純に導かれる力学系の場合である．

上の問いはもっと興味ある問いの古典力学版である．すなわち，力学系の量子力学的法則の経路積分の式から直接的に，平衡にある同じ系の統計力学法則の経路積分の式にいかにして進むべきか，という問いである．

問題10-9　次の式が運動方程式（10-92）に対する保存エネルギーを定義することを示せ．

$$E(t)=\frac{1}{2}m[\dot{x}(t)]^2-\frac{k}{2}x(t)x(t+a)+\frac{k}{2}\int_t^{t+a}dt'x(t'-a)\dot{x}(t') \qquad (10\text{-}93)$$

一般に（10-91）の S のように時間を陽に含まない（すなわち，$t\to t+$定数 に対して不変）任意の作用汎関数に対して，時刻 T におけるエネルギーに対する式 $E(T)$ が存在して，これは保存する．このことは次のようにしてわかる．$t>T$ に対して $\eta(t)=+\varepsilon/2$ かつ $t<T$ に対して $\eta(t)=-\varepsilon/2$ のとき（ε は定数），すべての経路を $x(t)$ から $x[t+\eta(t)]$ に変化させたとき，作用 S の1次変化を求めることにより $E(T)$ が得られる．δS は微小量 ε に対して $\varepsilon E(T)$ である．

問題10-10　時間的に一定の磁場中の粒子の統計力学を経路積分で定式化する問題を議論せよ．

第11章　変　分　法

この章では，経路積分を近似的に評価するために，変分原理に基づく方法を議論する．初めに例を用いて変分法を説明する．後で，変分法が有効な問題を考察する．

11-1　極 小 原 理

ある系の自由エネルギー F を評価したいとする．この問題は経路積分によって表現できる．まず，(10-4) で定義される分配関数

$$Z=e^{-\beta F} \tag{11-1}$$

から出発する．

(10-30) において分配関数を密度行列 $\rho(x,x)$ の積分として表した．10-2節では，$\rho(x,x)$ に対して核を用いた表式を求めた．その結果，次のように書くことができる．

$$Z=\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{x_1}^{x_1}\mathcal{D}x(u)\,e^{S/\hbar} \tag{11-2}$$

ただし「時間」変数 u はここでは虚数である．

10-3節で，ある特別な場合について，分配関数を定義する経路積分を評価するための摂動論の方法を展開した．この章では S が**実数**の場合に使えるもう 1 つの方法を述べる．磁場やスピンがない通常の場合，S は実数である．

この章の残りの部分では常に $\hbar=1$ となるような単位系をとることにする．結果の量子力学的特徴を見るために $\hbar$ を記号として含めておくことが必要なときには，次元解析から直ちに $\hbar$ を含めることができる．

次の 2 つの条件を満たす別の S' が求まったとしよう．第 1 の条件は，S' が簡単な形をしていて $\int\mathcal{D}x(t)\,e^{S'}$ や $\int\mathcal{D}x(t)\,Ge^{S'}$ [G も簡単な形の汎関数] が求められるということである．第 2 の条件は，積分 $\int\mathcal{D}x(t)\,e^{S}$ の中の重要な経路が $\int\mathcal{D}x(t)\,e^{S'}$ の中の重要な経路と類似しているということである．すなわち，S と S' はそれぞれの

絶対値が小さいときに類似している．

ここで，S' より得られる自由エネルギーを F' とする．すなわち

$$e^{-\beta F'}=\int_{-\infty}^{\infty}dx_1\int_{x_1}^{x_1}\mathcal{D}x(u)e^{S'} \tag{11-3}$$

と表すと，

$$\frac{\int dx_1\int\mathcal{D}x(t)e^{S}}{\int dx_1\int\mathcal{D}x(t)e^{S'}}=e^{-\beta(F-F')} \tag{11-4}$$

となる．$e^S=e^{S-S'}e^{S'}$ であるから（11-4）を次のように書くことができる．

$$\frac{\int dx_1\int\mathcal{D}x(t)e^{S-S'}e^{S'}}{\int dx_1\int\mathcal{D}x(t)e^{S'}}=e^{-\beta(F-F')} \tag{11-5}$$

つまり，$e^{-\beta(F-F')}$ は $e^{S-S'}$ の平均値として表されることになる．ただし平均値のとり方としては，まずそれぞれの経路に重み $\mathcal{D}x(t)e^{S'}$ を与え，同じ初期点と終点をもつすべての経路について平均するのである．平均の過程で，すべての可能な x_1 の値をとり入れる．

この先とるべき方法としては，$S-S'$ が小さくしたがって $F-F'$ も小さい量であると考えて，両辺をそれぞれの指数部分のべきで1次まで展開することである．しかしながら，この方法はいかがわしく見える．なぜなら β が大きい場合，$\beta(F-F')$ は小さくないからである．しかし，高次の項と比較してみると，この方法は $F-F'$ に対して正しい近似になっていることがわかる．

上の議論をもっと厳密にかつ説得力のあるものにするには，次のようにすればよい．x が確率変数であるとき，x が実数でかつ，平均操作における重みが正ならば，e^x の平均値は常に x の平均値の指数関数以上である．すなわち，$\langle x\rangle$ を x の加重平均とすると

$$\langle e^x\rangle\geq e^{\langle x\rangle} \tag{11-6}$$

が成り立つ．なぜならば，図11-1に示すように，e^x の曲線は下に凸なる関数であるから，この曲線上に質量（重み）が分布していると，これらの質量の重心は曲線の上方に存在する．この重心の高さは，これらの質点の高さの平均値 $\langle e^x\rangle$ である．これは，重心の水平座標すなわち平均値 $\langle x\rangle$ における曲線の高さ $e^{\langle x\rangle}$ を超える．

(11-5)の左辺において，正の重み $\mathcal{D}x(t)e^{S'}$ をつけて経路について $e^{S-S'}$ の平均値をとる．ここで S' と S は実数である．よって，(11-6) より，この平均値は $e^{\langle S-S'\rangle}$

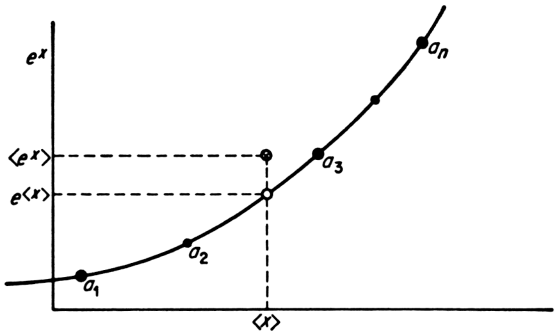


図11-1　重み因子 a_i は正であると仮定し，これをひもに沿って並ぶ質量とみなす．x の加重平均の指数関数 $e^{\langle x \rangle}$ は，指数関数の加重平均 $\langle e^x \rangle$ よりも下にこなければならない．なぜなら曲線 e^x が下に凸の関数だからである．$e^{\langle x \rangle}$ の値は曲線 e^x 上になければならないが，$\langle e^x \rangle$ はいくつかの点の重心であるから曲線よりも上にこなければならないのである．

を超える．ここで $\langle S-S' \rangle$ は同じ重み $\mathcal{D}x(t)e^{S'}$ による $S-S'$ の平均値である．すなわち，

$$\langle S-S' \rangle = \frac{\int dx_1 \int \mathcal{D}x(t)\, e^{S'}(S-S')}{\int dx_1 \int \mathcal{D}x(t)\, e^{S'}} \tag{11-7}$$

このとき

$$e^{\langle S-S' \rangle} \leq e^{-\beta(F-F')} \tag{11-8}$$

となる．これより

$$F \leq F' - \frac{1}{\beta}\langle S-S' \rangle \tag{11-9}$$

となる．

したがって最終結果は次のように表される．

$$F \leq F' - \delta \tag{11-10}$$

ただし

$$\delta = \frac{\frac{1}{\beta}\int dx_1 \int \mathcal{D}x(t)\, e^{S'}(S-S')}{\int dx_1 \int \mathcal{D}x(t)\, e^{S'}} \tag{11-11}$$

ここで最小原理をもつことは大変幸運なことである．いろいろな「作用」S' に対して $F'-\delta$ を計算する場合，最小の値を与える計算結果がもっとも真の自由エネル

ギー F に近い，ということになる*). もちろん，$S'=S$ ならば真の自由エネルギー F が得られるのである．S と S' の相違が何らかの意味で1次の微小量であるならば，$F'-\delta$ と F との差は2次の微小量となる，と考えてよい．

S' のもっともらしい一般形が予想できて，あるパラメーターが不確定である場合，そのパラメーターを未定にしたまま $F'-\delta$ を計算することができる．そして，F にもっとも接近した近似は $F'-\delta$ のとり得る最小値を与える．すなわち，パラメーターの「最適」値は，$F'-\delta$ を最小にするものである．「最適」という意味は $F-\delta$ と真の F との差が最小ということである．

同じ最小原理は，系の最低エネルギー状態 E_0 の近似値を求めるのにも用いられる．次の式を思い起こそう．

$$Z=e^{-\beta F}=\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} \tag{11-12}$$

系の温度が低くなるにつれて，すなわち，β が大きくなるにつれて，高いエネルギー値を含む項は小さくなり，この級数での重要性を失ってゆく．最終的に Z の級数では，最低エネルギーの項 $e^{-\beta E_0}$ だけが重要となる．すなわち

$$\lim_{\beta\to\infty} Z=e^{-\beta E_0} \tag{11-13}$$

ここで前の部分で展開した議論に従うと，単純に F を E_0 で置き換えてよいことになる．新しい作用 S' を含む経路積分の結果を E_0' と書くと，β の大きいところでの近似として

$$E_0 \leq E_0'-\delta \tag{11-14}$$

が導かれる．

この方法で E_0 を近似すると，自由エネルギー F の場合よりも計算がやや簡単になる．具体的には，経路の始点と終点が同じであるという条件を無視することができる．これを理解するには，(10-28) に戻って，β が大きくなると密度行列 $\rho(x',\ x)$ の中で0次の項が重要となり密度行列は $e^{-\beta E_0}\phi_0(x')\phi_0^*(x)$ に近づくということに注意する．よって，x' と x に対する依存性は乗数因子の中に現れるだけで関数の指数部分の性格に影響しない．この方法で E_0 を評価する際に本質的なのは，この指数部分の振る舞いなのである．

---

*) 繰り返し述べることになるが，S も S' も本来の物理的意味における作用汎関数でないことを強調しておく．なぜなら，「時間」変数として使う u は虚数だからである．しかし，汎関数 S，S' に対する経路積分の演算は，前に本来の物理的作用汎関数に対して行った演算と同じである．

11-2　変分法の応用

この変分原理を用いて分配関数を計算する1例として，1次元の運動をする単独粒子を考える．第10章で展開した方法を用いて，そのような粒子に対する作用を

$$S=-\int_0^\beta dt\left\{\frac{m}{2}\dot{x}(t)^2+V[x(t)]\right\} \tag{11-15}$$

と書く．よって，大きな β に対して，分配関数は

$$e^{-\beta E_0}\simeq\int dx_0\int_{x_0}^{x_0}\mathscr{D}x(t)\exp\left(-\int_0^\beta dt\left\{\frac{m}{2}\dot{x}(t)^2+V[x(t)]\right\}\right) \tag{11-16}$$

となる．

この経路積分は初めの出発点に戻る経路についてとる．経路積分が求まったあと，すべての可能な出発点について積分を行う．

10-2節において，同じ問題を考え，古典近似が視察によってどのようにして導かれるかを指摘した．高温の古典的極限，すなわち $\hbar$ と比較して kT が大きいとき，$\beta\hbar$ の値は小さいので x_0 から大きく離れた経路は寄与しない．よってポテンシャルは一定値 $V(x_0)$ で置き換えることができる．経路積分は定数を与えるだけで，(10-48) に示したように

$$e^{-\beta F_0}(\text{古典論})=\sqrt{\frac{m}{2\pi\beta}}\int dx\,e^{-\beta V(x)} \tag{11-17}$$

となる．

第10章では，古典論の結果に対する1つの量子力学的改良を行った．その改良とは，ポテンシャルを経路の平均値のまわりで展開し，その展開の2次までの項を使うものである．このとき，ある特別な平均操作によって得られるポテンシャル U を用いて，もっと改良することができた．本章の観点からすると，前の方法は変分法の1つの特別な応用であることがわかる．この点を明らかにするために，本章の記法と概念を用いて重要となるステップを復習する．

まず，適切な試行関数 $W(\bar{x})$ を導こうと思う．ここで $\bar{x}$ は1つの経路の平均位置であり，次の式で定義される．

$$\bar{x}=\frac{1}{\beta}\int_0^\beta dt\ x(t) \tag{11-18}$$

任意の経路に沿って，ポテンシャルを $W(\bar{x})$ で置き換えればこれは定数であるから，この経路に沿っての作用の新しい形は，

$$S' = -\int_0^\beta dt \, \frac{m}{2} \dot{x}^2 - \beta W(\bar{x}) \tag{11-19}$$

となる．この一般的な形を用いて，F' と $\langle S - S' \rangle$ を計算することが可能である．

この議論に沿って進む際に，(11-10) を用いる．(11-19) の式を代入すると，δ に対する式が得られる．

$$\delta = \frac{-\int dx_0 \int \mathcal{D}x(t) \left\{ \frac{1}{\beta} \int_0^\beta dt' \, V[x(t')] - W(\bar{x}) \right\} \exp\left(-\int_0^\beta dt \frac{m}{2} \dot{x}^2 \right) \exp[-\beta W(\bar{x})]}{\int dx_0 \int \mathcal{D}x(t) \exp\left(-\int_0^\beta dt \frac{m}{2} \dot{x}^2 \right) \exp[-\beta W(\bar{x})]} \tag{11-20}$$

次のことに注意しよう．(11-20) の経路積分に用いられる経路は同じ始点と終点をもつものであり，(11-16) と同様に，さらにすべての端点 x_0 についての積分を行わなければならないのである．

ある特定の平均値 $\bar{x}$ をもつ経路に限定し，計算の後の段階ですべての可能な $\bar{x}$ の値について積分するならば，δ の分子は (10-63) で導入した項 $I(\bar{x})$ と極めて類似している．$I(\bar{x})$ を議論するときに用いたのと同じ論拠で，δ の分子が t' に依存しないことがわかる．第10章で用いた方法により分子と分母にある経路積分をともに評価し，(10-65) から答えを導くことができる．まず

$$Y = x_0 - \bar{x} \tag{11-21}$$

とおいたことを思い起こそう．分母は，分子に現れる表式の特別な形にすぎないので，結果は

$$\delta = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \, [V(x_0) - W(\bar{x})] \exp\left[-\frac{6m}{\beta} (x_0 - \bar{x})^2 \right] \exp[-\beta W(\bar{x})]}{\int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \, \exp\left[-\frac{6m}{\beta} (x_0 - \bar{x})^2 \right] \exp[-\beta W(\bar{x})]} \tag{11-22}$$

(11-22) の分母における x_0 の積分は容易に行うことができ，$(\beta\pi/6m)^{1/2}$ となる．さらに，分子において因子 $W(\bar{x})$ を含む項の積分は同じ乗数を与える．分子における積分を行い，さらにその結果を関数 $\overline{V(\bar{x})}$ を用いて簡単化すると後の計算に便利である．$\overline{V(\bar{x})}$ は次のように定義する．

$$\overline{V(\bar{x})} = \sqrt{\frac{6m}{\pi\beta}} \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \, V(x_0) \exp\left[-\frac{6m}{\beta} (x_0 - \bar{x})^2 \right] \tag{11-23}$$

$\overline{V(\bar{x})}$ の形には，われわれ が導入した量子力学効果が現れている．この関数は (10-68) で定義された関数 $U(x_0)$ と同様に $V(x_0)$ の加重平均であり，その重み関数はガ

ウス型で幅は $(\beta\hbar^2/12m)^{1/2}$ である．2°K におけるヘリウム原子について，この幅は 0.7Å程度となる．しかし，室温では原子直径2.7Åの２％程度にすぎない．δ の値は次のように表される．

$$\delta=\frac{\int d\bar{x}\,[\,W(\bar{x})-\overline{V(\bar{x})}\,]\exp[-\beta W(\bar{x})]}{\int d\bar{x}\,\exp[-\beta W(\bar{x})]} \tag{11-24}$$

次の段階は，(11-10) に示したように，$F'-\delta$ の最小値を求めるという要請によって，$W(\bar{x})$ を評価することである．F' は次の式で定義される．

$$\begin{aligned}\exp(-\beta F')&=\int\mathcal{D}x(t)\,e^{S'}\\&=\int\mathcal{D}x(t)\exp\left[-\int_0^\beta dt\frac{m}{2}\dot{x}^2-\beta W(\bar{x})\right]\\&=\int d\bar{x}\,\exp[-\beta W(\bar{x})]\int_{\bar{x}\text{ 固定}}\mathcal{D}x(t)\exp\left(-\int_0^\beta dt\frac{m}{2}\dot{x}^2\right)\end{aligned} \tag{11-25}$$

この経路積分は簡単で，その値は $\sqrt{m/2\pi\beta}$ であるから

$$\exp(-\beta F')=\sqrt{\frac{m}{2\pi\beta}}\int d\bar{x}\,\exp[-\beta W(\bar{x})] \tag{11-26}$$

が得られる．

$W(\bar{x})$ の最適値を求めるという次の段階のために，$W(\bar{x})$ の微小変分によって $F'-\delta$ の値がどのように変化するかを求め，その変化を０とすることが必要となる．よって，W を

$$W\to W(\bar{x})+\eta(\bar{x}) \tag{11-27}$$

で置き換えたとして，(11-26) より F' の変化分は

$$\delta F'=\frac{\int d\bar{x}\;\eta(\bar{x})\exp[-\beta W(\bar{x})]}{\int d\bar{x}\,\exp[-\beta W(\bar{x})]} \tag{11-28}$$

で，(11-24) より δ の変分は

$$\delta[\delta]=\frac{\int d\bar{x}\;\eta(\bar{x})\{\beta[\overline{V(\bar{x})}-W(\bar{x})]+1\}\exp[-\beta W(\bar{x})]}{\int d\bar{x}\,\exp[-\beta W(\bar{x})]}+\frac{\int d\bar{x}\;\eta(\bar{x})\exp[-\beta W(\bar{x})]\times\int d\bar{x}\,[\,W(\bar{x})-\overline{V(\bar{x})}\,]\exp[-\beta W(\bar{x})]}{\left(\int d\bar{x}\,\exp[-\beta W(\bar{x})]\right)^2} \tag{11-29}$$

となることがわかる．(11-10) の右辺の定常値を求めるためには，

$$\delta F' - \delta[\delta] = 0 \tag{11-30}$$

が必要である．これは

$$W(\bar{x}) = \overline{V(\bar{x})} \tag{11-31}$$

のときに成り立つ．これは，$\delta=0$ でかつ F' が (11-23) で定義された古典論の自由エネルギーと同じ形であることを意味する．しかしながら，F' の定義におけるポテンシャルは $\overline{V(\bar{x})}$ で置き換えられた．すなわち，

$$\exp(-\beta F') = \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta}}\int d\bar{x}\ \exp[-\beta\overline{V(\bar{x})}] \tag{11-32}$$

ここで $\overline{V(\bar{x})}$ は有効古典論ポテンシャルであり，(11-23) に与えられている．大きな値の β に対して，自由エネルギーは本質的に最低エネルギー準位 E_0 である．よって，(11-32) は E_0 に対する近似を与えるものと解釈できる．よって，変分法によって第10章で得られたのと同じ結果が得られたことになり，また (10-67)，(10-68) が示されたことになる．

11-3 標準的変分法

量子力学では Rayleigh-Ritz の方法と呼ばれる標準的な変分法がある．次のようなものである．H を系のハミルトニアンとし，その最低エネルギー値を E_0 とすると，任意の関数 f に対して

$$E_0 \leq \frac{\int f^* Hf\ dv}{\int f^* f\ dv} \tag{11-33}$$

が成り立つ．この不等式の応用は広く，また証明も容易である．このハミルトニアンの固有関数 ϕ_n の級数として，関数 f を展開する．すなわち，$f=\sum a_n\phi_n$ とすると，明らかに次の式が成り立つ．

$$\frac{\int f^* Hf\ dv}{\int f^* f\ dv} = \frac{\sum_n |a_n|^2 E_n}{\sum_n |a_n|^2} \tag{11-34}$$

右辺の式は正の重み $|a_n|^2$ によるエネルギー値の平均であるから最小値 E_0 以上である．(11-33) に示された原理は (11-13) の原理と類似した特徴をもっている．実際，(11-33) は (11-13) の特別な場合である（もっと厳密にいうと，この結論は，

磁場を含まないラグランジアンから導かれるハミルトニアン H の場合に限定すべきものである．この限定の下に上の結論が成り立つ)．2つの式の間の関係を見るためには，次の例を考える：

作用 S が次のようなラグランジアンで与えられるものとする．

$$L=-\frac{1}{2}m\dot{x}^2-V(x) \tag{11-35}$$

ここで $V(x)$ は t に依存しない(t に依存すれば，もちろん，固定したエネルギー準位はなくなる)．1変数 x の場合に限定するが，一般の場合にも直ちに拡張できる．ここで，ラグランジアンが $\dot{x}A$ という項を含む場合，たとえば，ラグランジアンが磁場中の粒子を表す場合にも (11-13) が成り立つということに注意する．しかし，作用 S は複素数となる．この場合にも，(11-13) [あるいはそれを単純に修正したもの] が成り立つものと予想される．しかしこれはまだ証明されていない．よって今のところ，磁場のない場合に議論を限定する．このとき，大きい β の値の極限で，

$$\int\mathcal{D}x(t)\exp\left\{-\int_0^\beta dt\,\frac{m}{2}\dot{x}^2-\int_0^\beta dt\ \ V[x(t)]\right\}\sim e^{-\beta E_0} \tag{11-36}$$

が得られる．

試行作用 S' として，次の形を用いる．

$$S'=-\int_0^\beta dt\,\frac{m}{2}\dot{x}^2-\int_0^\beta dt\ \ V'[x(t)] \tag{11-37}$$

$V'(x)$ は別のあるポテンシャルである．これより

$$S-S'=\int_0^\beta dt\{V'[x(t)]-V[x(t)]\}. \tag{11-38}$$

すなわち

$$\delta=\frac{-\frac{1}{\beta}\int\mathcal{D}x(t)\,e^{S'}\int_0^\beta dt\,\{V[x(t)]-V'[x(t)]\}}{\int\mathcal{D}x(t)\,e^{S'}}. \tag{11-39}$$

これと同じように経路 $x(t)$ に依存する関数の平均値を定義しようとすると，t が0や β にあまり近接していないかぎり，その平均値は t にほとんど依存しないことがわかる．したがって，十分よい近似で，次のように書くことができる．

$$\delta=\frac{-\int\mathcal{D}x(t)\,e^{S'}\{V[x(t)]-V'[x(t)]\}}{\int\mathcal{D}x(t)\,e^{S'}}=-\langle V[x(t)]-V'[x(t)]\rangle \tag{11-40}$$

第2章に与えられた方法に従って，S' に付随する固有関数 ϕ'_n と固有値 E'_n がわかっ

ているとこの経路積分を評価することができる．たとえば，経路の始点と終点がそれぞれ x_1，x_2 の場合，次の式が得られる．

$$\langle f[x(t)]\rangle = \frac{\sum_{n,m} \exp[-(\beta-t)E'_n] \exp(-tE'_m)\phi'_n(x_2)\phi'^*_m(x_1) f_{nm}}{\sum_n \exp(-\beta E'_n)\phi'_n(x_2)\phi'^*_n(x_1)} \tag{11-41}$$

ここで

$$f_{nm} = \int dx \phi'^*_n(x) f(x) \phi'_m(x) \tag{11-42}$$

しかし，β が無限大に近づき t も同様に大きくなると（たとえば $t=\beta/2$），最低エネルギー項 E'_0 の指数関数以外の高いエネルギーの指数関数はすべて無視できる．よって極限では

$$\lim_{\beta\to\infty} \langle f\rangle = f_{00} \tag{11-43}$$

となる．

この結果を次のように書くことができる．

$$\delta = -\int dx\, \phi'^*_0 V(x) \phi'_0 + \int dx\, \phi'^*_0 V'(x) \phi'_0 \tag{11-44}$$

もちろん，この値を E'_0 から差し引かなければならない．しかし，H' が S' に付随するハミルトニアンならば，すなわち

$$H' = \frac{p^2}{2m} + V'(x) \tag{11-45}$$

ならば

$$H'\phi'_0 = E'_0 \phi'_0 \tag{11-46}$$

であるから，

$$E'_0 - \delta = \int dx\, \phi'^*_0 H' \phi'_0 + \int dx\, \phi'^*_0 V \phi'_0 - \int dx\, \phi'^*_0 V' \phi'_0 \tag{11-47}$$

となる．しかし真のハミルトニアンは，

$$H = \frac{p^2}{2m} + V = \frac{p^2}{2m} + V' + V - V' = H' + V - V' \tag{11-48}$$

と書けるから，

$$E_0 \leq \int dx\, \phi'^*_0 H \phi'_0 \tag{11-49}$$

となる．ここで，ϕ'_0 は規格化されていて，(11-45) で与えられるハミルトニアンの最低エネルギー状態に対応する波動関数である．(11-49) に示されるような最低エネルギー準位の評価の際に，任意のポテンシャル $V'(x)$ は波動関数 ϕ'_0 を通して効

いてくる．このポテンシャルは任意であるから，波動関数 ϕ_0 も任意である．よって，ポテンシャルを任意にとりそれから波動関数を求め，それから (11-49) の式を評価するということをする代わりに，まず波動関数を選び (11-49) を評価する．その際，その波動関数がポテンシャルに付随するものかどうかは気にしない．この操作の中で変えるべき関数はポテンシャル関数 $V'(x)$ というよりはむしろ波動関数 ϕ_0 である．そうすると，この結果は (11-33) の結果の言い換えにすぎないことがわかる．

この例で示したような問題にだけ (11-13) の概念が有用であるというならば，これだけ長い議論をした意味があまりないかも知れない．しかし，もっと複雑な積分に対して (11-13) が用いられる場合がある．その際，われわれの知るかぎり，積分は (11-33) の形に容易には変換されない．そのような例を次節で述べる．

11-4　極性結晶中の遅い電子[1]

塩化ナトリウムなどの極性結晶中を運動する電子を考える．電子はイオンと相互作用するが，イオンは固定されていない．よって電子によってその近傍の結晶格子は変形する．電子が動きまわると，格子変形の領域も一緒に動く．この電子と変形した環境とを一緒にして**ポーラロン**と呼ぶ．

格子変形の結果の1つは，電子のエネルギーが下がるということである．さらに，電子が動くときに，変形にあわせるようにイオンは動かなければならないので，電子の有効慣性質量（現在よく使われる言い方をすると，ポーラロン質量）は，格子が固定した点からなる場合の電子の質量と較べて大きい．このようなポーラロンの運動を量子力学的に解析することは極めて複雑である．これからいくつかの近似を行うが，それらを実際の場合に正当化することは極めて困難である．しかし，多くの物理学者によって研究された理想化された問題を考えることにする[2]．それらが研究された理由は，電子や結晶の実際の挙動と何らかの関係がありそうだということだけでなく，粒子と場の相互作用のもっとも簡単な例の1つであるということである．この理想化された問題を解く際に，経路積分変分法は大変有効である．

まず，イオンが結晶中に固定して動かない場合でも電子は非常に複雑なポテンシ

1　R.P. Feynman, Slow Electrons in a Polar Crystal, *Phys. Rev.* **97** (1955) 660.
2　たとえば H. Fröhlich, *Adv. Phys.* **3** (1954) 325. この論文には他の仕事が引用されている．

ャルの中を運動する．このような場合，電子に対する Schrödinger 方程式の解として，特徴的な波動 $\mathbf{k}$ をもつ解が存在することを示すことができる．このような解のエネルギー準位は一般に波数の複雑な関数である．しかし，エネルギー E と波数 $\mathbf{k}$ の間の関係は 2 次形式であると仮定する．

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m} \tag{11-50}$$

ここで m は定数である(必ずしも真空中の電子の質量ではない)．次に，電子が格子に及ぼす力は，負イオンを押しやり，正イオンを引き寄せるものであることに注意する．これらのイオンの運動を解析するときは，それらを 1 組の調和振動子とみなし，第 8 章の方法を用いる．しかしながら，必要な調和振動のモードは高振動数のものであり，異符号の電荷のイオンは逆方向に動くというモードである．それぞれのモードの振動数 $\omega_{\mathbf{k}}$ はモードの波数 $\mathbf{k}$ に実際に依存する．しかし，この依存性を無視し，ω は定数であると仮定する．

われわれの目的は，波数 $\mathbf{k}$ で特徴づけられる変形によって引き起こされる電気力を求め，この力の中での電子の相互作用を求めることである．ここで，原子構造を無視し，結晶の物質を単純に，分極波をもつ連続誘電体として取り扱う．$\mathbf{P}$ を分極とし，縦波の形で表されているとする．

$$\mathbf{P}=\frac{\mathbf{k}}{k}a_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{11-51}$$

このとき，イオンの電荷密度は

$$\rho=-\nabla\mathbf{P}=-i\,ka_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{11-52}$$

である．ポテンシャルを V とすると

$$\nabla^2V=-4\pi\rho \tag{11-53}$$

となる．よって，縦の進行波 $\mathbf{k}$ の振幅を $q_{\mathbf{k}}$ とすると，分極 $a_{\mathbf{k}}$ は $q_{\mathbf{k}}$ に比例する．分極波と電子の相互作用は項 $(q_{\mathbf{k}}/k)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ をすべての $\mathbf{k}$ について足し合わせたものに比例する．

電子のエネルギーと運動量は式 $E=p^2/2m$ で関係づけられているから，全系のラグランジアンは次のように表される．

$$L=\frac{1}{2}|\dot{\mathbf{r}}|^2+\sum_{\mathbf{k}}\frac{1}{2}(\dot{q}_{\mathbf{k}}^2-q_{\mathbf{k}}^2)+\left(\frac{2\sqrt{2}\pi\alpha}{V}\right)^{1/2}\sum_{\mathbf{k}}\frac{1}{k}q_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{11-54}$$

この式の第 1 項は固定格子中の電子のエネルギーで $\mathbf{r}$ は電子の位置である．第 2 項は分極が孤立して存在する場合の振動のラグランジアンである．ここですべての

分極波が同じ振動数をもつものと仮定し，モード $\mathbf{k}$ の座標を $q_{\mathbf{k}}$ とした．最後の項は，電子と格子振動の相互作用のラグランジアンである．V は結晶の体積を表し，α は定数である．今後公式の表現を簡単化するために，上の式は無次元の形で表した．すなわち，エネルギー，長さ，時間の尺度を適当に選び，$\hbar$ だけでなく振動子の共通振動数 ω と電子の質量 m も 1 となるようにする．結合定数 α は無次元の比となり

$$\alpha=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty}-\frac{1}{\varepsilon}\right)\mathrm{e}^2 \tag{11-55}$$

となる．ここで，ε と ε_∞ はそれぞれ静誘電率，高周波誘電率である．典型的な場合，たとえば NaCl 結晶のような場合，α の値は 5 程度である．われわれが計算するエネルギーの値は $\hbar\omega$ を単位とする．

ここで，調和振動子の運動を完全に解いて，電子の量子力学的運動を調べることができる．たとえば，初めに振動子が基底状態にあって電子が $\mathbf{r}_1$ にあり，終わりに振動子がやはり基底状態にあって電子が $\mathbf{r}_2$ に到達しているという事象の振幅は

$$G_{00}(2,1)=\int\mathcal{D}\mathbf{r}(t)\ e^{iS} \tag{11-56}$$

である．ここで第 8 章の結果を用いた．また作用は

$$S=\frac{1}{2}\int dt\left|\frac{d\mathbf{r}}{dt}\right|^2+\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{\sqrt{2}\pi\alpha}{k^2}\int dt\int ds\ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}(t)}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}(s)}e^{-i|t-s|} \tag{11-57}$$

である．波数 $\mathbf{k}$ についての積分を行うと

$$S=\frac{1}{2}\int dt\ |\dot{\mathbf{r}}|^2+\frac{\alpha i}{\sqrt{8}}\int dt\int ds\ \frac{e^{-i|t-s|}}{|\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(s)|} \tag{11-58}$$

が得られる．$G_{00}(2,1)$ という量は電子の初めと終わりの位置 $\mathbf{r}_1$，$\mathbf{r}_2$ に依存し，また考える時間間隔 T に依存する．この関数は核であるから，時間間隔 T の関数として考えると，Schrödinger の波動方程式の解である．したがって，エネルギー準位 E_m に比例する振動数が指数部分に現れる．われわれが今求めるのは，これらのエネルギー準位の中の最低のものである．

変分原理を展開する際に，すでに説明したように，実時間 T に対する核には関心がない．代わりに，β が大きいときに (11-8) に現れるような量を求める．(11-58) に到るすべての段階を追うことにより，時間変数 β の虚数値に対して核が

$$K(2,1)=\int\mathcal{D}\mathbf{r}(t)\ e^{S} \tag{11-59}$$

という形になることが直ちに示される．ここで変数 t の領域は 0 から β までであ

り，また

$$S=-\frac{1}{2}\int dt\left|\frac{d\mathbf{r}}{dt}\right|^2+\frac{\alpha}{\sqrt{8}}\int dt\int ds\frac{e^{-|t-s|}}{|\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(s)|} \tag{11-60}$$

である．この結果は，(11-58) において t を虚数 it で置き換えることによって予想できるものである．β が大きいとき漸近的にこの核は $e^{-\beta E_0}$ に比例するようになる．

ここで，やや複雑な経路積分が得られたが，これを変分原理で求めてみる．ある簡単な S' を選び，真の S に対する近似とし，E' と δ を求める．

(11-60) において，ある特定の時刻*)における粒子は過去の位置と「相互作用」する，ということに注意する．その相互作用の大きさは 2 つの時刻における位置の相対距離に反比例し，また時間差に対して指数関数的に減少する．その理由は，過去において電子が結晶格子に与えた攪乱が消えるまでにいくらか時間がかかる，ということである．すなわち，イオンが緩和するのにある時間がかかり，その緩和時間の間，電子は過去の攪乱を「感じる」のである．

作用 S' としてこの性質をもつものを試みよう．ただし，結合法則として距離の逆数を含むのではなくて，引力が放物型井戸という幾何学的形状をもつようにする．これは，距離 $|\mathbf{r}(s)-\mathbf{r}(t)|$ がしばしば極端に大きくなる場合に，悪い近似となる．しかし，指数型の時間因子によって相互作用が消えるまでの時間は有限であるから，この差が大きな値をとることは積分に重要な寄与をしない．よって次の形を試みる．

$$S'=-\frac{1}{2}\int dt\,|\dot{\mathbf{r}}|^2-\frac{1}{2}C\int dt\int ds\,|\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(s)|^2e^{-w|t-s|} \tag{11-61}$$

定数 C は，電子と過去につくられた攪乱との間の引力の強さを表す量である．これを調整パラメーターとする．さらに，困難を伴わないで，指数関数の切断則に調整定数 w を含めることができる．この w は 1 とは異なってもよい．この余分のパラメーターによって，距離の逆数の効果を放物形の効果で置き換えたことによる不十分さを部分的に補うことができる．[放物形の項 $|\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(s)|^2$ に定数を加えても自由度は増えない，ということに注意する．なぜなら，そのような定数項は E_0' の式を評価するときに抜け落ちるのである．]後で評価する際に，E_0' を最小にするように変数パラメーター C と w を調整する．

われわれが用いる作用 S' は 2 次形式であるから，それから導かれる経路積分は第

*) (11-60) の t は現実の時間ではなく積分変数にすぎないが，10-2節で見たように時間と考えると便利である．

2 章で述べた方法によって容易に求められる．

(11-60) と (11-61) を比較することにより，次の式が得られる．

$$\frac{1}{\beta}\langle S-S'\rangle=\frac{\alpha}{\sqrt{8}}\int ds\left\langle\frac{1}{|\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(s)|}\right\rangle e^{-|t-s|}+\frac{1}{2}C\int ds\langle|\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(s)|^2\rangle e^{-w|t-s|}$$
$$=A+B \tag{11-62}$$

この式の右辺の第 1 項 A に注意を集中することにする．この項において，$|\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(s)|^{-1}$ をフーリエ変換で表す．実際，この項は，(11-57) から (11-58) に到るフーリエ変換の結果である．よって

$$|\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(s)|^{-1}=\int d^3\mathbf{k}\exp\{i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(s)]\}/(2\pi^2k^2) \tag{11-63}$$

それゆえに，次の量を調べる必要がある．

$$\langle\exp\{i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{r}(\tau)-\mathbf{r}(\sigma)]\}\rangle=\frac{\int\mathcal{D}\mathbf{r}(t)\,e^{S'}\exp\{i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{r}(\tau)-\mathbf{r}(\sigma)]\}}{\int\mathcal{D}\mathbf{r}(t)\,e^{S'}} \tag{11-64}$$

分子の積分は次の形をしている．

$$I=\int\mathcal{D}\mathbf{r}(t)\exp\left[-\frac{1}{2}\int dt\left|\frac{d\mathbf{r}}{dt}\right|^2-\frac{1}{2}C\int dt\int ds\,|\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(s)|^2e^{-w|t-s|}\right.$$
$$\left.+\int dt\mathbf{f}(t)\cdot\mathbf{r}(t)\right] \tag{11-65}$$

ここで $\mathbf{f}(t)$ は

$$\mathbf{f}(t)=i\mathbf{k}\delta(t-\tau)-i\mathbf{k}\delta(t-\sigma) \tag{11-66}$$

という特殊な形である．これから，(11-65) の $\mathbf{f}$ （あるいは $\mathbf{k}$）に対する依存性を評価する．ただし規格化因子は (11-64) で抜け落ちるので評価する必要はない．ついでながら，(11-65) において，3 つの直交成分は分離できることに注目しよう．よってスカラーの場合だけ考えればよい．積分の方法は，第 2 章でガウス型経路積分を評価するために導入したものと同じである．よって $X(t)=X'(t)+Y(t)$ を代入する．ここで $X'(t)$ は指数部分を最大とする特別な関数である．したがって，積分変数は $Y(t)$ となる．指数部分は $X(t)$ について 2 次であり，$X'(t)$ はその極値を与えるから，$Y(t)$ について 2 次となる．よって Y は f を含まない因子として分離される．Y について積分すると，重要でない定数（T のみに依存する）が得られる．したがって，その定数部分を除くと I は次のような形になる．

$$I=\exp\left[-\frac{1}{2}\int dt\ \dot{X}'(t)^2-\frac{1}{2}C\int dt\int ds\ \{X'(t)-X'(s)\}^2e^{-w|s-t|}+\int dt\ f(t)X'(t)\right] \tag{11-67}$$

ここで，X' はこの表式を最小にする関数である［ただし，時間区間が 0 から T までならば，境界条件として $X'(0)=X'(T)=0$ とすると便利である］．変分問題として考えると，積分方程式

$$\frac{d^2X'(t)}{dt^2}=2C\int ds[X'(t)-X'(s)]e^{-w|t-s|}-f(t) \tag{11-68}$$

が得られる．(11-68) を用いると，(11-67) は単純化されて

$$I=\exp\left[\frac{1}{2}\int dt\ f(t)X'(t)\right] \tag{11-69}$$

となる．(11-68) を解いて (11-69) に代入すればよいことになる．これを行うには，次の量を定義する．

$$Z(t)=\frac{w}{2}\int ds\ e^{-w|t-s|}X'(s) \tag{11-70}$$

これは

$$\frac{d^2Z(t)}{dt^2}=w^2[Z(t)-X'(t)] \tag{11-71}$$

を満たす．一方 (11-68) より

$$\frac{d^2X'(t)}{dt^2}=\frac{4C}{w}[X'(t)-Z(t)]-f(x) \tag{11-72}$$

この 2 つの方程式は直ちに分離できて解ける．$X'(t)$ に対する解を (11-69) に代入すると，(11-65) の場合に次の式が得られる．

$$\begin{aligned}I&=\exp\{i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{X}(\tau)-\mathbf{X}(\sigma)]\}\\&=\exp\left[-\frac{2Ck^2}{v^2w}(1-e^{-v|\tau-\sigma|})-\frac{w^2}{2v^2}k^2|\tau-\sigma|\right]\end{aligned} \tag{11-73}$$

ここで v は次式で定義される．

$$v^2=w^2+\frac{4C}{w} \tag{11-74}$$

(11-73)の結果は正しく規格化されている．なぜなら $\mathbf{k}=0$ に対して正しい値を与えるからである．(11-73) を (11-63) に代入すると，$\mathbf{k}$ についての積分が得られる．これは単純なガウス型であるので，A に代入することにより

$$A=\pi^{-1/2}\alpha v\int_0^\infty d\tau\left[w^2\tau+\frac{v^2-w^2}{v}(1-e^{-v\tau})\right]^{-1/2}e^{-\tau} \tag{11-75}$$

が得られる．B を求めるには，$\langle|\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(s)|^2\rangle$ が必要である．これは，(11-73)の両辺を $\mathbf{k}$ について k^2 の次数まで展開することによって得られる．したがって

$$\frac{1}{3}\langle|\mathbf{r}(\tau)-\mathbf{r}(\sigma)|^2\rangle=\frac{4C}{v^3w}(1-e^{-v|\tau-\sigma|})+\frac{w^2}{v^2}|\tau-\sigma| \tag{11-76}$$

B における積分は容易に行える．式は次のように簡単になる．

$$B=\frac{3C}{vw} \tag{11-77}$$

最後に E_0'，すなわち作用 S' に付随するエネルギーが必要である．これを得るためのもっとも容易な方法は，(11-16) の両辺を C について微分することである．直ちに次式が得られる．

$$\frac{CdE_0'}{dC}=B \tag{11-78}$$

(11-77) と (11-74) を考慮して積分すると

$$E_0'=\frac{3}{2}(v-w) \tag{11-79}$$

となる．なぜなら $C=0$ に対して $E_0'=0$ だからである．$E_0'-B=\frac{3}{4v}(v-w)^2$ であるから最終的にエネルギーの表式として次の式が得られる．

$$E=\frac{3}{4v}(v-w)^2-A \tag{11-80}$$

ここで A は (11-75) で与えられる．v と w は，エネルギーの最小値を得るために独立に変化させることのできる2つのパラメーターとみなすことができる．

あいにく，A の中の積分を閉じた形で行うことができないので，E を完全に決めるためには数値積分が必要である．しかし，いろいろな極限の場合，近似的な表式を求めることができる．α が大きい場合は，大きな v に対応する．$w=0$ と選ぶと積分は次のようになる．

$$A=\pi^{-1/2}\alpha v^{1/2}\int_0^\infty d\tau\, e^{-\tau}(1-e^{-v\tau})^{-1/2}=\frac{\alpha\Gamma(1/v)}{v^{1/2}\Gamma(1/2+1/v)} \tag{11-81}$$

また $E_0'=3v/4$ となる．これは (11-37) において固定した調和束縛ポテンシャルを用いることに対応する．v が大きいとき，$e^{-v\tau}$ は無視できるので，$A=\pi^{-1/2}\alpha v^{1/2}$ となる．α が 5.8 より小さく $w=0$ のとき，(11-80) は$v=0$ でないかぎり極小値を与えない．よって $w=0$ の場合，α のすべての領域に対して成り立つ式は得られない．この困難点にもかかわらず，(11-81)の結果は比較的単純でかなり正確である．$\alpha>6$ に対しては，かなり大きな値の v だけが重要となり，漸近的な式（$v>4$ のとき 1

%の誤差)

$$A=\alpha\left(\frac{v}{\pi}\right)^{1/2}\left(1+\frac{2\ln 2}{v}\right) \tag{11-82}$$

が便利である．しかし，Fröhlich は $\alpha=6$ における不連続を重大な難点と考えた．われわれの方法ではこの難点を避けることができる．w を 0 でない値にすることによってこれを行う．

$w\neq 0$ の場合，小さな α に対して (11-75) を調べよう．極小値は w に近い v の値のところで実現する．したがって，$v=(1+\varepsilon)w$ と書き ε を小さい量と考え (11-75) の根号を展開する．これより

$$A=\alpha\frac{v}{w}\left[1-\varepsilon\int_0^\infty\frac{d\tau}{2\pi^{1/2}}\tau^{-3/2}e^{-\tau}(1-e^{-w\tau})+\cdots\right] \tag{11-83}$$

が得られる．積分は

$$2w^{-1}[(1+w)^{1/2}-1]=P \tag{11-84}$$

である．(11-80) の問題は，この次数で，次の式を極小にすることに対応する．

$$E=\frac{3}{4}w\varepsilon^2-\alpha-\alpha\varepsilon(1-P) \tag{11-85}$$

すなわち，

$$\varepsilon=\frac{2\alpha(1-P)}{3w} \tag{11-86}$$

のときに E は極小となるが，これは α が小さいときのみ正しい．なぜなら ε は小さいものと仮定したからである．以上よりエネルギーは

$$E=-\alpha-\frac{\alpha^2(1-P)}{3w} \tag{11-87}$$

となる．したがって，われわれの方法は，α が小さいときにも補正を与える．$w=3$ のときに最小となる．この場合に

$$E=-\alpha-\frac{\alpha^2}{81}=-\alpha-1.23\left(\frac{\alpha}{10}\right)^2 \tag{11-88}$$

が得られる．これは w のとり方に敏感ではない．たとえば，$w=1$ とすると，1.23 は 0.98 におちるだけである．Lee と Pines[1] の方法は，この次数で厳密に (11-88) の結果を与える．摂動展開は羽賀[2] によって 2 次まで行われた．それによれば，$(\alpha/10)^2$ の

1 T. Lee and D. Pines, Interaction of a Nonrelativistic Particle with a Scalar Field with Application to Slow Electrons in Polar Crystals, *Phys. Rev.* **92** (1953), 883.

2 E. Haga, Note on the Slow Electrons in a Polar Crystal, *Prog. Theor. Phys.* **11** (1954), 449.

項の係数の厳密な値は1.26である．よってわれわれの変分法は小さいαに対して驚くべきほど正確である．

αが大きいという逆の極限は大きなvに対応する．そして後に見るように，wは1に近い．$v \gg w$であるから，(11-76) の中の積分は第1近似で (11-81) となる．これを漸近形として用いることができる．wについての近似は，(11-75) の根号の中を$w/v \ll 1$として展開することによって得られる．さらに$e^{-v\tau}$は無視できる．このようにして

$$E=\frac{3}{4v}(v-w)^2-\alpha\left(\frac{v}{\pi}\right)^{1/2}\left(1+\frac{2\ln 2}{v}-\frac{w^2}{2v}\right) \qquad (11\text{-}89)$$

が得られる．vが大きいという近似の範囲で，$w=1$，$v=(4\alpha^2/9\pi)-(4\ln 2-1)$のときに，このエネルギーは極小となる．このとき

$$E=-\frac{\alpha^2}{3\pi}-3\ln 2-\frac{3}{4}=-0.1061\alpha^2-2.83 \qquad (11\text{-}90)$$

が得られる[3]．近似では，Eが上限でありつづけない．なぜなら，あいにく$1/\alpha^2$の次数の項はおそらく正であると考えられるからである．

この方法を基礎とする詳細な数値的研究は，T.D. Schultz[4] によってなされた．デジタルコンピュータを用いて，Schultz は，いろいろなαの値に対して，極小値を与えるvとwの値を研究した．またEを評価して，他のいろいろな理論から得られる値と比較した．特に，彼は Lee - Low - Pines[5]，Lee - Pines[6]，Gross[7]，Pekar[8]，Bogoliulov[9]，Tyablikov[10] の理論より自己エネルギーを求めた．それぞれを，E_{llp}，E_{lp}，E_g，E_{pbt}と表すことにする．

3　S.I. Pekar, Theory of Polaron, *Zh. Eksp. i Teor. Fiz.* **19** (1949) 796 では，αが大きいとき$E=-0.1088\alpha^2$となることが示されている．

4　T.D. Schultz, Slow Electrons and Polar Crystals : Self-energy, Mass and Mobility, *Phys. Rev.* **116** (1959), 526.

5　Lee, Low and Pines, The Motion of Slow Electrons in a Polar Crystal, *Phys. Rev.* **90** (1953), 297.

6　前掲

7　E.P. Gross, Small Oscillation Theory of the Interaction of a Particle and a Scalar Field, *Phys. Rev.* **100** (1955), 1571.

8　I. Pekar, "Untersuchungen über die Elektronentheorie der Kristalle", Akademie-Verlag, Berlin, 1954.

9　S.I. Bogoliubov. On a New Form of the Adiabatic Theory of Disturbances in the Problem of Interaction of Particles with a Quantum Field, *Ukr. Mat. Zh.* **2** (1950), 3.

10　S.V. Tyablikov, An Adiabatic Form of Perturbation Theory in the Problem of the Interaction of a Particle with a Quantum Field, *Zh. Exsperim. i Teor. Fiz.* **21** (1951), 377.

表 11-1

α	3	5	7	9	11
v	3.44	4.02	5.81	9.85	15.5
w	2.55	2.13	1.60	1.28	1.15
E_f	−3.1333	−5.4401	−8.1127	−11.486	−15.710
E_{1p}	−3.10	−5.30	−7.58	− 9.95	−12.41
E_g	−3.09	−5.24	−7.43	− 9.65	−11.88
E_{pbt}			−6.83	−10.31	−14.7

Feynman 理論によって得られた α，v，w の値とエネルギー値（E_f）は表11-1に与えられている．また，他の理論から得られた結果と比較してある．それらは Schultz の論文から転載した．この表では，ω と $\hbar$ は値 1 をもつものと仮定されている．すべての α の値について E_f の値が他の理論値よりも小さいことに注意しよう．

第12章　確率論における諸問題

前のいくつかの章で，多数の量子力学的問題を扱うためにどのようにして経路積分を使うかを述べた．これらの問題はその物理的性質からして確率論的問題である．またわれわれは統計力学のある側面を解析するために，経路積分の方法を用いた．そこでは関数の確率論的性格によって経路積分の技巧が特に有効であった．この線に沿って，この方法が特別な価値ある応用をもつ広い確率論の諸問題に議論を展開していこう．

多くの確率的問題を調べることが本章の目的である．それらは2つの種類にわけられる．まず，経路積分の考えを直接古典的な確率論的問題に応用することを述べる．これは量子力学への応用のみを扱ってきたこれまでのすべての章と極めて異なる．次に，確率と量子力学の両方が絡んでくる問題を扱う．本章ではこれらを詳細に扱うことができない．いくつかの例によってある種の問題がどのようにして定式化されるかの概要を述べ，経路積分の他の応用について読者に示唆するに留める．

確率の問題に対して経路積分を直接応用しようとする主な根拠は，経路積分によって経路や関数の確率の概念を直接扱うことができるということである．この考えを明らかにするために，離散的事象や連続変数に応用された確率概念のよく知られたもの*) から段階的に進むことにする．

12-1　ランダムなパルス

初めに離散的変数に対する典型的な確率の問題を考える．一連の離散的事象がランダムな時刻に起こっているという状況があるとする．たとえば，宇宙線が検出器に入射する場合，雨が地上の特に印をつけた領域に降る場合などである．粒子がランダムな時刻に降下することを知っているが，任意の長い期間 T の間に $n=T\mu$ 個の粒子が観測されるものと期待する．すなわち，μ は平均計測率である．

*）Harold Cramér, *Mathematical Methods of Statistics,* (Princeton University Press, Princeton, N.J., 1951.) 通常の確率論の知識を前提とする．

もちろん，実際の測定においては，記録される粒子数 n は一般に期待値に一致しない．しかし直接に次のように問うことができる．粒子数の期待値が $\bar{n}$ である期間に n 個の粒子を観測する確率はいくらか．これは Poisson 分布

$$P_n = \frac{\bar{n}^n}{n!\,e^{\bar{n}}} \tag{12-1}$$

によって与えられる．

他方，別の種類の確率的問題を問うこともできる．たとえば，次のように問う．1つの粒子の入射と次の粒子の入射との間の間隔が t である確率はいくらか．実際，このように述べられた問題に対する正しい答えはない．時間間隔が t 以上である確率を問うならば，答えは $\exp(-\mu t)$ である．すなわち，t がある領域に入る場合の問いに対して答えがある．よって，ある特定の値に興味があるならば，無限小の領域に限定して次のように問う．t を中心とする領域 dt に時間間隔が入る（微小）確率はいくらか．答えは次のように書かれる．

$$P(t)dt = \mu e^{-\mu t}dt \tag{12-2}$$

このようにして連続変数の確率分布の概念がつくられる．$P(t)$ は時間間隔が t である確率を単位時間当たりで表したものである．変数が x を中心とする領域 dx にある確率が $P(x)dx$ であるとき，x の確率分布を $P(x)$ と表す．これを容易に2変数に拡張することができ，x と y の確率分布を $P(x, y)dxdy$ と表す．これにより，変数 x，y を xy 平面の領域 R に見出す確率が $\int_R dxdy\, P(x, y)$ で与えられるのである．

確率の概念をさらに拡張する．個々の変数の分布でなく，曲線の分布を考える．次のような問いに答えを与えるような確率関数むしろ確率汎関数を構成しようと思う．ある物理現象のある特定の時間的歴史を得る確率はいくらか．たとえば，抵抗器中の電圧，住居の価格，2変数としては緯度と経度の関数としての海面の形の確率など．よって**関数の確率**を考えることになる．

これを次のように表す．関数 $f(t)$ を観測する確率は汎関数 $P[f(t)]$ である．しかし，このような確率に関する問題は，特定の曲線を見ている領域を定義したときのみ意味をもつ．上記の例において「領域 dt 内に時間間隔を見出す確率はいくらか」と問わなければならなかったと同様に，今度は「ある多かれ少なかれ限定された関数族の中にある関数を見出す確率はいくらか」と問わなければならない．たとえば，

興味ある時間の経過の中で，値が a と b の区間内に限られる曲線を見出す確率である．このような曲線の部分集合を族 A と呼ぶことにする．このとき，次のように問う．関数 $f(t)$ を族 A に見出す確率はいくらか．その答えを経路積分の形に書く．

$$\int_A \mathcal{D}f(t)P[f(t)] \tag{12-3}$$

ここで積分は族 A のすべての関数について行う．

実際，この式は多変数の確率関数に類似なものとみなすことができる．時間を離散的区間に分割し，それらが t_1，t_2，…という値をとるものとすると，それぞれの時刻における関数の値 $f(t_1)$，$f(t_2)$，…$=f_1$，f_2，…は多変数の分布関数と類似している．ある特定の曲線を観測する確率は，ある特定の値の集合 f_1，f_2，…を領域 df_1，df_2，…に見出す確率 $P(f_1, f_2, \cdots)df_1df_2\cdots$ とみなすことができる．

離散的時間区間の数が無限大になる極限をとると，領域 $\mathcal{D}f(t)$ に連続曲線 $f(t)$ を見出す確率が（12-3）の経路積分の被積分関数として得られる．これが本章の残りの部分で展開する確率概念であり確率汎関数である．

12-2　特性関数

経路の確率汎関数と通常の変数の確率関数との類似を用いることは有用である．平均値など，多くの概念が 2 つの方法で共通している．離散的値をとる量に対する通常の確率分布について，特定の数 n を観測する確率を P_n とすると，平均値は

$$\sum_{n=1}^{\infty} nP_n = \bar{n} \tag{12-4}$$

となる．連続的に分布している変数に対しては

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ P(x)x = \bar{x} \tag{12-5}$$

となる．同様にして，汎関数 $Q[f(t)]$ の平均値は次のように表される．

$$\frac{\int \mathcal{D}f(t)\ P[f(t)]Q[f(t)]}{\int \mathcal{D}f(t)\ P[f(t)]} = \langle Q \rangle \tag{12-6}$$

この最後の式で第 7 章と同様に経路積分を分母に含めた．これは常に規格化の問題があることを思い起こすためである．原理的には，分布関数の経路積分を行い，それを 1 とおくことが可能である．よって最初に規格化定数を評価する．しかしながら，多くの実際の場合，関数を規格化しないで式の分母と分子で互いに打ち消し

合うようにするほうが便利である．実際上，規格化定数を評価することが極端に困難である場合がある．

関数の平均値が経路積分の概念で表されるように，ある特定の時刻 $t=a$ における関数の 2 乗平均も同様に表される．

$$\langle[f(a)]^2\rangle=\frac{\int\mathcal{D}f(t)\,P[f(t)][f(a)]^2}{\int\mathcal{D}f(t)\,P[f(t)]} \tag{12-7}$$

これは汎関数の特別な場合である．

(12-5) で評価されるような関数の平均値の中で，もっとも重要なものの 1 つは e^{ikx} の平均値である．これは特性関数と呼ばれ，

$$\phi(k)=\langle e^{ikx}\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}dx\;e^{ikx}P(x) \tag{12-8}$$

である．これはモーメント母関数と呼ばれることもある．これは単に $P(x)$ のフーリエ変換であり，分布のさまざまな特性を評価するのに極めて有用な関数である．なぜなら，これは分布関数そのものを知ることと等価であるからである．この事実は逆変換

$$P(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dk\;e^{-ikx}\phi(k) \tag{12-9}$$

を行うことが可能であることの結果である．

分布の重要なパラメーターの多くは，特性関数の導関数をとることによって決まる．たとえば，x の平均値は

$$\langle x\rangle=-i\left.\frac{d\phi(k)}{dk}\right|_{k=0} \tag{12-10}$$

である．これは (12-8) の各式を k について微分してから $k=0$ とおくことによって示される．実際，そのような一連の関係式が存在する．

$$\phi(0)=1,\quad \phi'(0)=i\langle x\rangle,\quad \phi''(0)=-\langle x^2\rangle,\quad \cdots \tag{12-11}$$

もちろん，われわれの次の段階は，特性関数の概念を汎関数分布の場合に一般化することである．離散的時間区間の描像に戻ることによって，そのような特性関数の数学的定義を構成することができる．それから，核 $\exp(ik_1f_1)\exp(ik_2f_2)\cdots$ を用いて多変数の確率関数のフーリエ変換を行いたい．時間区間の数が無限大の極限をとると，この核は単純に $e^{i\int dt\,k(t)f(t)}$ となる．この汎関数の平均値をとることによって特性汎関数を求めることができる．(12-6) を用いると，

$$\Phi[k(t)]=\frac{\int\mathscr{D}f(t)\,P[f(t)]e^{i\int dt\,k(t)f(t)}}{\int\mathscr{D}f(t)\,P[f(t)]} \tag{12-12}$$

が得られる．この汎関数はまた重要な特別の性質をいくつかもっている．たとえば，$\Phi(0)=1$ であり，ある特定の時刻 $t=a$ における $f(t)$ の平均値は

$$\langle f(a)\rangle=-i\frac{\delta}{\delta k(a)}\Phi[k(t)]\bigg|_{k(t)=0} \tag{12-13}$$

である．ここで，7-2節で述べたような汎関数微分の技巧を用いた．

原理的には経路積分によるフーリエ変換の逆変換を行うことができ，確率汎関数を次のように表すことができる．

$$P[f(t)]=\int\mathscr{D}k(t)\,\Phi[k(t)]e^{-i\int dt\,k(t)f(t)} \tag{12-14}$$

ここで，もちろん，経路積分は k 関数の空間でなされている．

後の解釈のところで必要となるので，次のことに注意しておこう．関数 $f(t)$ がランダムでなく，ある特定の関数 $F(t)$ であることが確定しているとしよう．すなわち，$f(t)=F(t)$ 以外の場合に $P[f(t)]=0$ であるとする．このとき，特性関数は

$$\Phi[k(t)]=e^{i\int dt\,k(t)F(t)} \tag{12-15}$$

となる．

12-3　雑　　音

これまで展開してきた諸概念をある特別な例に応用し，その中でさらにいくつかの概念を展開しよう．ある種のパルスを計測するものとしよう．たとえば，Geiger 計測器における宇宙線の衝突，抵抗器中の熱雑音パルスなどである．そのような場合，パルスは単にエネルギーの離散的衝撃としてでなく，電圧の上昇下降として表される．よってこのようなパルスに伴う実際の電圧の時間変化を注意深く調べると，$t=0$ で生じるパルスに対して $g(t)$ という形をしている．したがって，パルスが t_0 で生じる場合，電圧曲線の形は $g(t-t_0)$ であると考えられる．

この計測実験を長さ T の時間にわたって行うこととする．この間に時刻 t_1，t_2，$\cdots t_n$ を中心とするたくさんのパルスが生じるものとする．この実験における電圧の時間発展は $\sum_{j=1}^{n}g(t-t_j)$ となる．すべての事象が起こる時刻を知っているから，確率関数は単に確実性を表現しているにすぎない．(12-15) を用いると，対応する特性

関数は

$$\Phi[k(t)]=\exp\left[i\sum_{j=1}^{n}\int dt\ k(t)g(t-t_j)\right] \tag{12-16}$$

となる.

実験を行う前に，電圧のある特定の時間発展を見出す確率を求めたいとする．その場合，n 個の事象が時間間隔 T 全体に一様な確率でランダムに分布しているものとする．すなわち，1 つの事象が時間間隔 dt の間に起こる確率は dt/T であるとする．この場合，特性汎関数は次のようになる．

$$\begin{aligned}\Phi[k(t)]&=\int_0^T\frac{dt_1}{T}\int_0^T\frac{dt_2}{T}\cdots\int_0^T\frac{dt_n}{T}\exp\left[i\sum_{j=1}^{n}\int dt\ k(t)g(t-t_j)\right]\\&=\left[\int_0^T\frac{ds}{T}e^{i\int dt\ k(t)g(t-s)}\right]^n\end{aligned} \tag{12-17}$$

括弧内の式を A と表すと，この結果は A^n と表される．

時間間隔 T の間の事象の数が Poisson 分布をしているならば，すなわち，それぞれの事象の発生が他の事象の発生の時刻に依存しないで単位時間当たりの事象の数の期待値が定数 μ であるとすると，時間間隔 T の間の事象の数の期待値は $\mu T=\overline{n}$ である．特性関数は

$$\Phi[k(t)]=\sum_{n=0}^{\infty}A^n\frac{\overline{n}^n}{n!}e^{-\overline{n}} \tag{12-18}$$

である．この式の右辺の和は指数関数の展開形であるから，特性関数を次のように書くことができる．

$$\begin{aligned}\Phi[k(t)]=e^{-(1-A)\overline{n}}&=\exp\left[-\mu T\left(1-\int_0^T\frac{ds}{T}e^{i\int dt\ k(t)g(t-s)}\right)\right]\\&=\exp\left[-\mu\int_0^T ds(1-e^{i\int dt\ k(t)g(t-s)})\right]\end{aligned} \tag{12-19}$$

よって多くの異なる状況に対して，特性関数を求めることができる．次に，さまざまな近似の条件の下にこの結果を議論しよう．

パルスが非常に弱く，単位時間当たりのパルス数の期待値 μ が大きい場合を考えよう．この場合，$g(t)$ は小さいので $e^{i\int dt\ k(t)g(t-s)}$ をべき級数で展開し，特性関数を次のように近似する．

$$\exp\left[i\mu\int_0^T ds\int_0^T dt\ k(t)g(t-s)\right]=\exp\left[i\mu G\int_0^T dt\ k(t)\right] \tag{12-20}$$

ここで $G=\int_0^T dt\ g(t)$ とおいた．これはパルスの面積である．これより，(12-15)

の Φ の表式に $F(t)=\mu G$（t に依存しない定数）を代入したものになっていることがわかる．これを言い換えると，$f(t)$ が確定的に μG であるということである．すなわち，関数 $f(t)=\mu G$ を見出す確率が 1 であり，他の関数になる確率が 0 ということである．小さなパルスが多数積み重なると，ほとんど定常的な電圧が生じ，その値は毎秒当たりのパルス数 μ にそれぞれのパルス電圧の平均値 G を掛けたものであるということができる．次に，高次の近似に行き，ほぼ直流の電圧がどのように揺らぐか（不規則となるか）を調べる．

(12-20) は (12-19) の特性汎関数の式における指数 $e^{i\int dt\, k(t)g(t-s)}$ の 1 次近似である．次に 2 次の項を取り入れることにしよう．これは

$$-\frac{\mu}{2}\int_0^T ds\int_0^T dt\int_0^T dt' k(t)g(t-s)k(t')g(t'-s) \tag{12-21}$$

となる．この式を簡単化するために 2 つの隣接するパルスの重なりを示す関数を定義する．

$$\lambda(\tau)=\int dt\ g(t)g(t+\tau) \tag{12-22}$$

これを代入すると，2 次の項は

$$-\frac{\mu}{2}\int_0^T dt\int_0^T dt'\ k(t)k(t')\lambda(t-t') \tag{12-23}$$

となる．

1 次と 2 次の両方を含めると，特性汎関数は

$$\Phi[k(t)]=e^{i\mu G\int dt\, k(t)}e^{-\frac{\mu}{2}\int dt\int dt'\, k(t)k(t')\lambda(t-t')} \tag{12-24}$$

となる．この式の初めの因子は一定の平均レベルである．電圧パルスを考える場合，直流レベルと呼ばれるものである．望むならば，このレベルを無視し，$f(t)$ の原点をずらすことによって平均レベルのまわりの変動のみを考慮することができる．すなわち，$f(t)$ の原点をずらすことにより，因子 $e^{i\int dt\, k(t)F(t)}$ を取り出すことができる［すなわち，$f(t)=F(t)+f'(t)$ と表して，$f'(t)$ の確率分布とその特性汎関数を調べる］．このように原点をずらすことにより，直流レベルのまわりの揺らぎを調べることができる．

(12-24) に対する特別な近似で，しばしば適切であるものを述べよう．一般に，$\lambda(\tau)$ は τ の狭い関数である．パルス形 $g(t)$ は有限時間に上昇し下降する．2 つのパルスが非常に長距離隔たっているとき，その重なり積分は 0 である．これは τ が大きくなると $\lambda(\tau)$ が急激に 0 になるということを言い換えたものである．この結果，

$\lambda(\tau)$ が十分狭ければ，(12-24) の第 2 項は次のように近似される．

$$e^{-(q/2)\int dt[k(t)]^2} \tag{12-25}$$

ここで $q=\mu\int_{-\infty}^{\infty}\lambda d\tau$ を代入した．これは確率分布

$$P[f(t)]=e^{-(1/2\sigma)\int dt[f(t)]^2} \tag{12-26}$$

と等価である．ここで述べたような揺らぎはしばしば**ガウス雑音**と呼ばれる．雑音関数を記述する分布汎関数の特性は通信理論で近年よく研究されてきた．雑音スペクトルの多くの特性が定義され評価されてきた．以下と次節（ガウス雑音を扱う）で同様な議論を行う．

もう 1 つの例を挙げて，どのようにして特性汎関数を構成するかを示す．ランダムな時刻に到来するパルスがすべて同じ形 $u(t)$ をしているとし，そのパルスの高さがパルスによって異なるものとする．つまり，典型的なパルスは $au(t)$ と表される．高さ a は正負どちらの値もとりうるものとする．ここでパルスの時刻がランダムな間隔で時刻 t_j に生じ，高さはランダムな正負の値 a_j をとるものとする．このようなランダムなパルスは

$$f(t)=\sum_j a_j u(t-t_j) \tag{12-27}$$

と表される．初めに事象のランダムさを無視すると，(12-16) と等価な特性汎関数が得られる．

$$\Phi[k(t)]=\exp\left[i\sum_j a_j\int dt\ k(t)u(t-t_j)\right] \tag{12-28}$$

次に，パルスの高さのランダムさを考慮し，j 番目のパルスの高さ a_j が da_j の範囲にある確率を $p(a_j)da_j$ とすると，特性汎関数は

$$\Phi[k(t)]=\int da_1p(a_1)\int da_2p(a_2)\cdots\exp\left[i\sum_j a_j\int dt\ k(t)u(t-t_j)\right] \tag{12-29}$$

となる．もちろん，a_j の値に対する確率関数はそれぞれ特性関数やモーメント母関数と関係している．この関数を $W[\omega]$ と表し，次のように定義する．

$$W[\omega]=\int e^{i\omega a}p(a)da \tag{12-30}$$

このとき，Φ は

$$\Phi[k(t)]=\prod_j W\left[\int dt\ k(t)u(t-t_j)\right] \tag{12-31}$$

と表される．

(12-17) を導いたときと同様に進み，パルスが生じる時刻は時間 $0<t<T$ で一様

に分布しているという考えを導入する．この時間にちょうど n 個のパルスがあるものとすると，特性汎関数は

$$\Phi=\left(\frac{\gamma}{T}\right)^n \tag{12-32}$$

となる．ここで

$$\gamma=\int ds\ W\left[\int dt\ k(t)u(t-s)\right] \tag{12-33}$$

である．

(12-18) を導いたときと同様に，パルスが起こる時刻の分布が Poisson 分布の仮定に合うものとすると，(12-32)の式に因子 $\bar{n}^n e^{-\bar{n}}/n!$ を掛けなければならない．ここで前と同様に，$\bar{n}=\mu T$ は時間 T における平均数である．n について和をとると，

$$\begin{aligned}\Phi[k(t)]&=e^{-\mu(T-\gamma)}\\&=\exp\left(-\mu\int_0^T ds\left\{1-W\left[\int dt\ k(t)u(t-s)\right]\right\}\right)\end{aligned} \tag{12-34}$$

が得られる．

この結果の特別な例として，パルスの形が極端に狭いものとする．実際，パルス関数をデルタ関数で近似できるものと仮定する．つまり，$u(t)=\delta(t)$．このとき，特性汎関数は

$$\Phi[k(t)]=\exp\left(-\mu\int_0^T ds\{1-W[k(s)]\}\right) \tag{12-35}$$

となる．次に，高さの分布が Gauss 型でその平均値が 0 で 2 乗平均の平方根が σ であるとする．すなわち，通常の正規分布

$$p(a)da=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}e^{-\frac{a^2}{2\sigma^2}}da \tag{12-36}$$

である．この場合，特性関数 $W[\omega]$ は

$$W[\omega]=e^{-\frac{\sigma^2\omega^2}{2}} \tag{12-37}$$

となる．このとき Φ は

$$\Phi[k(t)]=\exp\left[-\mu\int_0^T ds(1-e^{-(\sigma^2/2)[k(s)]^2})\right] \tag{12-38}$$

となる．

このように，仮定した条件に合うような特性汎関数 $\Phi[k(t)]$ を導くことができることがわかった．この導出の中のどの段階においても，これを 2 次形式にする近似

は有効である．たとえば，今述べたばかりの場合，パルス高の 2 乗平均が小さいことは弱い信号に対応する．このときある時間間隔に到来するパルスの数の期待値が小さくなければ，(12-38) は次の式でよく近似できる．

$$\Phi=\exp\left\{-\frac{\mu\sigma^2}{2}\int dt[k(t)]^2\right\} \tag{12-39}$$

このような分布は白色雑音と呼ばれる．

12-4　ガウス雑音

特性汎関数がガウス型であるようなタイプの分布は多くの状況で現れる．ここではこれについて議論する．

これまでガウス型（定義関数の 2 次式の指数関数）の確率分布を述べてきた．ランダムパルスの Poisson 分布の仮定により導入された指数項を 2 次で近似した結果ガウス汎関数が導かれたのであるが，多くの物理過程はその性質上実際ガウス分布をしているようである．伝統的な確率論では，正規分布（ガウス分布）は，ランダムに生じる多くの独立事象の組み合わせの結果としての物理現象に合致する．これは確率論の中心極限定理の結論である*)．同じ結論は分布汎関数でも成り立ち，物理現象の研究の多くの重要な場合は，ガウス分布をもつという結果となる．今後言及するために，ガウス特性汎関数のもっとも一般的な形をここに書く．

$$\Phi[k(t)]=e^{i\int dt\, k(t)F(t)}e^{-\frac{1}{2}\int dt\int dt' k(t)k(t')A(t,t')} \tag{12-40}$$

直流レベルのまわりの電圧揺らぎの分布を導くときに議論したように，上の式の初めの因子は $f(t)$ を定義するときに原点をずらすことにより除くことができる．つまり $f'=f-F(t)$ を定義すればよい．次に，われわれが記述している系が時間の絶対値によらないように振る舞うとするならば，核 $A(t,t')$ は $A(t-t')$ という形をとらなければならない．

実際の物理的状況で，この特定の関数 A はある種の実験状況における機構によって定義される．あるいは系が上記の分布関数のように振る舞うように，現実の一部を近似することにより定義されることもある．雑音スペクトルについて上の導出で行った近似が 1 つの例である．この例では $A(t,t')=\mu\lambda(t-t')$ とおいた．いずれの場合も，特性汎関数 Φ が (12-40) の 2 次形式すなわちガウス型で適当に近似されるかぎり，この関数を使うことによって得られる系の振る舞いについての定理は同じ

---

*) 前提書 pp. 213ff.

である．

もちろん，すでに，ガウス汎関数をどのように扱うべきかを知っている．なぜなら，前章までに多くの時間を割いて，この汎関数をいろいろな方法で扱ってきた．この特別の場合，因子 i が現れていることは，典型的な量子力学の場合と異なる．7-4節で実数であった関数はここでは虚数である．しかしながら，この点についての数学的側面を復習する必要はない．結果の細かい点におけるいくつかの相違点に注意しそれに備えるだけで十分である．

(12-40) の特性汎関数に対応する確率分布は

$$P[f(t)]=\exp\left\{-\frac{1}{2}\int dt\int dt'\,[f(t)-F(t)][f(t')-F(t')]B(t,t')\right\} \qquad (12\text{-}41)$$

である．ここで関数 $B(t,t')$ は $A(t,t')$ の逆核である．すなわち，関数 A，B は次の関係にある．

$$\int d\tau A(t,\tau)B(\tau,s)=\delta(t-s) \qquad (12\text{-}42)$$

問題12-1　これを証明せよ．

第7章で導入した方法により，分布のパラメーターはすべて特性汎関数から計算される．

時間によらないガウス雑音の物理特性についてもっと詳細に調べてみよう．すなわち，特性汎関数

$$\Phi[k(t)]=e^{-\frac{1}{2}\int dt\int dt'k(t)k(t')A(t-t')} \qquad (12\text{-}43)$$

をもつ分布を調べよう．この関数 $A(\tau)$ は相関関数と呼ばれる．(12-43)の意味は特定の雑音関数 $f(t)$ を観測する確率が

$$P[f(t)]=e^{-\frac{1}{2}\int dt\int dt'f(t)f(t')B(t-t')} \qquad (12\text{-}44)$$

であるということである．この最後の式に現れる関数 B は相関関数 A の逆である．すなわち，$\int B(t-s)A(s)ds=\delta(t)$ である．つまり，

$$\mathcal{P}(\omega)=\int d\tau\ A(\tau)e^{i\omega\tau} \qquad (12\text{-}45)$$

が $A(\tau)$ のフーリエ変換ならば，$B(\tau)$ のフーリエ変換は $1/\mathcal{P}(\omega)$ である．

まず，この分布汎関数の性質のいくつかを計算してみよう．最初に雑音信号の平均値が0であることを示す．これは (12-13) のようにある特定の時刻 $t=a$ におけ

る雑音関数の平均値が

$$\langle f(a)\rangle = -i\frac{\delta\Phi}{\delta k(a)}\bigg|_{k(t)=0} \tag{12-46}$$

であるからである．この式で（12-43）の汎関数微分は

$$\frac{\delta\Phi}{\delta k(a)} = \left[-\int dt\ k(t)A(t-a)\right]\Phi \tag{12-47}$$

で与えられる（7-2節を参照）．特定の関数 $k(t)=0$ に対して評価すると 0 となる．

次に，雑音関数の 2 乗の平均値を求める．もっと適切な言い方をすれば，時刻 a と b における 2 つの雑音関数の積の期待値を求める．これは雑音の相関関数と呼ばれ，

$$\begin{aligned}\langle f(a)f(b)\rangle &= -\frac{\delta^2\Phi}{\delta k(a)\delta k(b)}\\ &= A(b-a)\Phi - \left[\int dt\, k(t)A(t-a)\right]\left[\int dt'\ k(t')A(t'-b)\right]\Phi\end{aligned} \tag{12-48}$$

である［(12-12) の両辺を 2 回微分せよ］．これを関数 $k=0$ に対して評価すると単純に $A(b-a)$ となる．それ故に，A は相関関数と呼ばれるのである．

12-5　雑音スペクトル

雑音分布のもっとも有用な特性は，雑音のパワースペクトルである（問題 6 -26を参照）．これは雑音関数 のフーリエ変換の 2 乗の平均値として定義される．すなわち，

$$\phi(\omega) = \int dt\ f(t)e^{i\omega t} \tag{12-49}$$

の 2 乗平均である．以前の結果を使うと，これを評価することができる．

$$\begin{aligned}\langle|\phi(\omega)|^2\rangle &= \left\langle \int da\ f(a)e^{i\omega a}\int db\ f(b)e^{-i\omega b}\right\rangle\\ &= \int da\int db\ \langle f(a)f(b)\rangle e^{i\omega(a-b)}\\ &= \int da\ \mathcal{P}(\omega)\end{aligned} \tag{12-50}$$

ここで A の相関関数の Fourier 変換 $\mathcal{P}(\omega)$ を用いた［(12-45) を参照］．

(12-50) の最終段階で定義される積分を実行すると，もちろん，結果は発散する．よって，求める 2 乗平均はある有限の時間間隔に対してのみ定義される．単位時間をとると，毎秒当たりの平均出力は

$$\text{毎秒当たりの}\ |\phi(\omega)|^2\ \text{の平均} = \mathcal{P}(\omega) \tag{12-51}$$

である．

これらの一般的結果を，多数の小さなパルスからつくられる雑音という特別な例に応用することができる．この場合の相関関数は (12-22) で導入された $\mu\lambda(\tau)$ である．すなわち，

$$A(\tau)=\mu\int d\tau\ g(t)g(t+\tau) \tag{12-52}$$

これより出力関数は

$$\mathcal{P}(\omega)=\mu\int dt\int d\tau\ g(t)g(t+\tau)e^{i\omega\tau}=\mu|\gamma(\omega)|^2 \tag{12-53}$$

であることがわかる．ここで $\gamma(\omega)$ はパルス関数 $g(t)$ のフーリエ変換である．(12-53) は振動数を用いて定義されているので，実際にパワースペクトルと呼ばれる．この問題について，もっと直接的にこの単純な結果を説明すると次のようになる．パルスが時刻 t_i に生じ $f(t)=\sum_i g(t-t_i)$ であるならば，$f(t)$ のフーリエ変換は $\phi(\omega)=\sum_i \gamma(\omega)e^{i\omega t_i}$ である．よって，$\phi(\omega)$ の 2 乗の平均値は次のようになる．

$$\langle|\phi(\omega)|^2\rangle=\sum_{i,j}|\gamma(\omega)|^2e^{i\omega(t_i-t_j)} \tag{12-54}$$

しかし，時刻 t_i はランダムであり他の $t_j(j\neq i)$ とは独立であるから，$i\neq j$ なる項はすべて 0 となる．なぜなら，$e^{i\omega(t_i-t_j)}$ の平均は 0 だからである．$i=j$ なる項のみが残る．それぞれの項は $|\gamma(\omega)|^2$ であり，項の数は μT である．よって毎秒当たりの $\langle|\phi(\omega)|^2\rangle$ の平均値は $\mu|\gamma(\omega)|^2$ である．

特性関数が (12-25) の白色雑音の特性によって近似できるという特別な場合，$A(t-t')=$(定数)$\times\delta(t-t')$となる．これより，$\mathcal{P}(\omega)$ が ω によらない定数になることがわかる．すべての振動数において単位振動数幅に対するパワー［毎秒当たりの $|\phi(\omega)|^2$］は同じである．

ここで述べている分布として，$f(t)$ に対してでなく，そのフーリエ変換 $\phi(\omega)$ に対して直接確率分布を与えると便利である．また特性汎関数についても，$k(t)$ を用いずにそのフーリエ変換

$$K(\omega)=\int dt\ k(t)e^{-i\omega t} \tag{12-55}$$

を用いると非常に便利である．これらの関数を用いると，(12-43) に対応する雑音分布の特性汎関数は

$$\Phi=e^{-\frac{1}{2}\int\frac{d\omega}{2\pi}|K(\omega)|^2\mathcal{P}(\omega)} \tag{12-56}$$

である．これは（12-55）の逆を直接（12-26）に代入することによって得られる．(12-26）に対応する確率汎関数は

$$P=e^{-\frac{1}{2}\int\frac{d\omega}{2\pi}\,|\phi(\omega)|^2[1/\mathcal{P}(\omega)]} \tag{12-57}$$

である．次のようにして（12-57）の結果を（12-56）から直ちに導くことができる．

$$e^{i\int dt\,k(t)f(t)}=e^{i\int\frac{d\omega}{2\pi}\,K(\omega)\phi(\omega)} \tag{12-58}$$

に注意すると，(12-14）から

$$P=\int\mathcal{D}K(\omega)\Phi e^{-i\int\frac{d\omega}{2\pi}\,K(\omega)\phi(\omega)} \tag{12-59}$$

が導かれる．

ω の可能な値が離散的で微小の間隔 $\varDelta$ をもつものとすると，(12-56）と（12-57）の指数の積分は Riemann 和に置き換えられ，経路積分は

$$P=\prod_{\omega}\int dK(\omega)\,e^{-\frac{\varDelta}{2}|K(\omega)|^2\mathcal{P}(\omega)-i\varDelta K(\omega)\phi(\omega)} \tag{12-60}$$

となる．ω のそれぞれの値に対して積分を別々に行うことができ（完全平方式にすることにより），

$$\prod_{\omega}e^{-\frac{(\varDelta/2)|\phi(\omega)|^2}{\mathcal{P}(\omega)}} \tag{12-61}$$

が得られる．積を全部掛け合わせると (12-57) が得られる．１つの振動数に生じる事柄は他の振動数に生じることと独立であることは明らかである．また振動数 ω における信号の強さ $\phi(\omega)$ はガウス型に分布していて，その２乗平均は $\mathcal{P}(\omega)$ に比例していることも明らかである．

12- 6　Brown 運動

経路積分の方法は，問題の解を求める際に他の方法でも解けないときは実際上役に立たないのが通常である．しかしながら，これまで議論してきて経路積分に明るくなった読者は，経路積分を確率の問題に応用すると経路積分の表現とその論理が非常に単純で直接的であることに気づくであろう．

たとえば, Brown 運動論において線形系を考える．揺動力 $f(t)$ によって駆動される減衰調和振動子を考える．振動子の質量を１と仮定して次の式を解く．

$$\ddot{x}-\gamma\dot{x}+\omega_0{}^2x=f(t) \tag{12-62}$$

ここで $x(t)$ は振動子の座標である．関数 $f(t)$ が特定できず，確率分布 $P_f[f(t)]$ によって与えられているとき，さまざまな応答 $x(t)$ に対する確率分布 $P_x[x(t)]$ はどう

なるであろうか．(12-62) は x と f の関係を与える．すなわち，各々の $f(x)$ に対して 1 つの $x(t)$ がある．よってある x の分布は対応する f の分布と同じである．

$$P_x[x(t)]\mathcal{D}x(t)=P_f[f(t)]\mathcal{D}f(t) \tag{12-63}$$

ここで x は (12-62) によって f と関係している．一般に $\mathcal{D}x(t)$ と $\mathcal{D}f(t)$ の間の関係に対して非常に注意を要する．「体積」要素の間に「ヤコビアン」と類似のものがあるからである．しかし(上のように) x と f の関係が線形ならば，このヤコビアンは定数である．よって経路積分の場合によく行ったように，解を最後の段階で規格化することができるとするならば，

$$P_x[x(t)]=(\text{定数})\times P_f[\ddot{x}-\gamma\dot{x}+\omega_0{}^2x] \tag{12-64}$$

が得られる．これは形式解である．P_f がガウス型ならば，P_x もガウス型であり，いろいろな方法で問題を解くことができる．$\omega_0{}^2$ と γ が時間によらない場合はフーリエ級数の方法がもっとも明快である．

いずれにせよ，多くの問題が定式化でき，(12-64) を出発点として用いると，完全にあるいは部分的に解くことができる．特別の例を考察する．速い粒子が物質中を通り抜け，その間に原子核のところを通る結果として，速度がわずかながら急激に変化する．図12-1に示すように，厚さ T を通ったあと，原点(入射の直線経路をそのまま伸ばしたところ) から距離 D のところに現れかつ偏角 θ で運動している確率はいくらか．

相互作用によって粒子の縦速度成分はほとんど失われず，また粒子が通る物質は

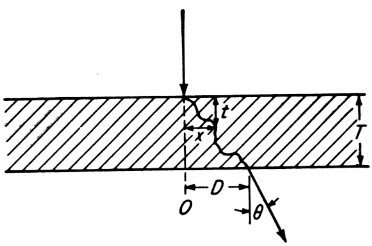


図12-1　高速粒子が，厚さ T の物質層に垂直に入射する．入射方向に平行に t の深さまで飛行したあとには，物質中の核との数多くの相互作用によって距離 x だけ初めの軌道の延長線上からずれる．事実上，物質相から出るときには，点 O (偏向がないときに物質からとび出す位置) から距離 D のところから出る．そして初めの入射方向と角度 θ をなす方向に飛行する．

均質であると仮定する．さらに，θ は常に小さく運動は多数の衝突の結果であり，1つ1つの衝突の効果は小さいものと仮定する．微小な厚さ dt における衝突数の期待値は μ で，1つの衝突で起こる偏角の角度 $\varDelta$ の確率分布は $p(\varDelta)d\varDelta$ であると仮定する．さらに，この確率分布による $\varDelta$ の2乗平均値は

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\varDelta\ \varDelta^2 p(\varDelta) = \sigma^2 \tag{12-65}$$

で与えられるものとし，後に $\mu\sigma^2 = R$ とおく．

粒子の入射軌道を含む2次元平面に射影された運動に限定して考えることにする．これと垂直な面内の運動も同様な規則に従い，いずれの面内の運動も互いに独立であるとみなされる．図12-1に示したように，板の中の通過の深さを t で表し，その点における平面内の運動の方向を θ で表し，入射軌道を伸ばしたところから測った粒子の位置を x で表す．これらのパラメーターの間に $dx = \theta dt$，$\dot{x} = \theta$ という関係がある．

θ の変化は急激に起こるものと仮定する．すなわち，$\dot{\theta} = f(t)$ とおく．ここで関数 f はランダムな間隔と高さをもつデルタ関数の和からなる．つまり，$\ddot{x} = f(t)$ であり，$P_f[f(t)]$ は次のような特性汎関数をもつ．

$$\Phi = e^{-\mu \int ds\{1 - W[k(s)]\}} \tag{12-66}$$

ここで

$$W[\omega] = \int d\varDelta\ p(\varDelta) e^{i\omega\varDelta} \tag{12-67}$$

$\varDelta$ の平均値は0であると仮定し，また偏角自体小さいものと仮定したことに注意する．したがって $W[\omega]$ を展開して

$$W[\omega] = \int d\varDelta\ \ p(\varDelta)\left(1 + i\omega\varDelta - \frac{\omega^2}{2}\varDelta^2 + \cdots\right) \tag{12-68}$$

と表し，$\varDelta$ の2次までの項のみを使うと，$W[\omega] = 1 - \omega^2\sigma^2/2$ が得られ，

$$\Phi = e^{-\frac{1}{2}R\int ds[k(s)]^2} \tag{12-69}$$

となる．これは

$$P_f[f(t)] = e^{-\frac{1}{2R}\int dt[f(t)]^2} \tag{12-70}$$

を意味する．よって

$$P_x[x(t)] = (\text{定数}) \times \exp\left\{-\frac{1}{2R}\int_0^T dt[\ddot{x}(t)]^2\right\} \tag{12-71}$$

粒子が入射するときの初期条件を $x(0)=0$, $\dot{x}(0)=0$ とし，粒子が変位 D と運動の

角度 θ をもって出ていく確率分布 $P(D, \theta)$ を評価したい．物質中で粒子のとる経路を精密に知ることが必要ではなく，粒子が条件 $x(T)=D$，$\dot{x}(T)=\theta$ をもって出てくることに関心がある．よってこの確率を，すべての経路についての積分によって次のように表す．

$$P(D, \theta)=\int \mathscr{D}x(t)\exp\left(-\frac{1}{2R}\int_0^T dt[\ddot{x}(t)]^2\right) \tag{12-72}$$

ここで積分に含まれる経路は仮定された端点条件を満たす．この積分は3-5節の方法により実行できる．積分はガウス型であり，経路

$$\ddot{\ddot{x}}(t)=0 \tag{12-73}$$

で作用は極値となる．この方程式の解で仮定された条件を満たすものは

$$x(t)=(3D-\theta T)\left(\frac{t}{T}\right)^2+(\theta T-2D)\left(\frac{t}{T}\right)^3 \tag{12-74}$$

である．(12-72) の指数関数の被積分関数にこの経路を使うと，

$$\frac{1}{2R}\int_0^T dt[\ddot{x}(t)]^2=\frac{6}{RT^3}\left(D-\frac{\theta T}{2}\right)^2+\frac{\theta^2}{2RT} \tag{12-75}$$

が得られる．これより，求める確率分布は

$$P(D, \theta)=(\text{定数})\times\exp\left[-\frac{6}{RT^3}\left(D-\frac{\theta T}{2}\right)^2-\frac{\theta^2}{2RT}\right] \tag{12-76}$$

である．

いくつかの実際的な場合に，原点からの粒子の厳密な距離に関心があるのでなく，むしろ板を離れるときの偏角に関心がある．(12-76) の分布関数全体が与えられていると，D のすべての値について積分することにより，角度についてのみの分布関数を評価することが簡単である．結果は $e^{-(\theta^2/2RT)}$ である．これは期待されていた結果である．なぜなら，単位厚さの間に受ける偏角の 2 乗平均値が R であることをすでに仮定しているからである．よって全体の厚さ T に対してはこの値は RT となる．

次に，特定の方向 θ に運動して現れてくる粒子のみに注目しこれらの粒子の出てくる位置 D の分布関数を考えよう．確率分布が $D=\theta T/2$ で最大値をとることがわかる．最終的な偏角 θ が厚さの 1 次関数として 0 から最終値 θ まで増大する形で生じてきたと仮定したときに，この $D=\theta T/2$ が得られる．この場合，板を通過する間での平均値は $\theta/2$ ということになる．

問題12- 2　確率関数 $P(D, \theta)dDd\theta$ を規格化するのに必要な定数が

$$(\text{定数})=\sqrt{\frac{6}{\pi RT^3}}\sqrt{\frac{1}{2\pi RT}} \tag{12-77}$$

であることを示せ.

12- 7　量 子 力 学

本節と次節で量子力学の統計問題をどのように定式化したらよいかを述べる. 量子力学では固有の方法で確率が内在している. なぜなら, 1つの決まった状態にいてもいろいろな状態にある確率をもっている. しかし, さらに, 外的な不確定性もある. たとえば, 状態がわかっていないとしよう. ただ状態の確率だけが与えられているものとする. この状況は, 初期条件が知られていなくて初期条件の確率分布だけが知られているという古典力学の状況と類似性がある. 統計力学におけるそのような状況はすでに扱った(第10章を見よ). しかしこれはエネルギー E の状態が確率 $e^{-E/kT}$ をもつという非常に特殊な場合である. ここではもっと一般的に論じる.

与えられた外場 $V(t)$ の下における量子力学系の振る舞いは求められるが, ポテンシャルが不確定で確率分布 $P[V(t)]\mathscr{D}V(t)$ をもつとき, なにがいえるであろうか. 実際, それぞれの $V(t)$ に対して解いてから, 平均をとるべきなのか, あるいは $V(t)$ の平均をとってから, 問題を定式化する方法があるのだろうか(そうであることを望む. なぜなら, 平均をとってから統計的問題を解くほうが, 実際もとの問題の一般的な解を広い条件の下に解くことよりもずっとやさしいということがしばしば起こるからである). この節で, 後者の定式化を求める. それから, 量子力学系が古典系によって攪乱されるだけでなく, 他の量子力学系でそれ自身不確定性をもつ系によって攪乱される場合を議論する.

この章の主たる目的は, このような問題がどのように定式化できるかを示すことである. 上に述べた特殊な問題を解くことを詳細に扱うことをしない. それらを提示したのは, 単に求める一般的定式化を理解しやすくするためである.

初めに, 量子力学系と Brown 運動の類似性を議論したい. すなわち, 無摂動作用 $S(q)$ をもつ量子力学系が外場ポテンシャルの作用の下にあってその作用を

$$S_V(q)=S(q)+\int dt\ q(t)V(t) \tag{12-78}$$

とする[*)].

次のような問題を扱おう．ある早い時刻 t_i に座標 $q(t_i)=q_i$ から出発して終時刻 t_f に位置 q_f に到達する確率はいくらか．それは振幅の2乗である．$|K(q_f, t_f; q_i, t_i)|^2$．すなわち，系が初期に波動関数 $\phi(q)$ の状態にあり終わりに波動関数 $\chi(q)$ にあるとしたとき，ϕ から χ への遷移確率は

$$P[\chi(q);\phi(q)]=\left|\int dq_f\int dq_i\ \chi^*(q_f)K(q_f, t_f; q_i, t_i)\phi(q_i)\right|^2$$
$$=\int dq_f\int dq_f'\int dq_i\int dq_i'\ \chi^*(q_f)\chi(q_f')K(q_f, t_f; q_i, t_i)$$
$$\times K^*(q_f', t_f; q_i', t_i)\phi(q_i)\phi^*(q_i') \tag{12-79}$$

である．このような問題はすべて

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i)K^*(q_f', t_f; q_i', t_i) \tag{12-80}$$

を評価できれば解ける．最初の因子は経路積分 $\int\mathcal{D}q(t)\ e^{iS[q(t)]}$ であり，2番目の複素共役量は $\int\mathcal{D}q(t)\ e^{-iS[q(t)]}$ である**)．それぞれの積分は適当な端点をもつ経路についてとる．(12-80)の積を書く際に，2番目の積分の経路変数を $q'(t)$ と書く．(12-80) を**二重経路積分**として表す．

$$\int\mathcal{D}q(t)\int\mathcal{D}q'(t)\ e^{iS[q(t)]-iS[q'(t)]} \tag{12-81}$$

このような積分をいろいろな端点について足し合わせると，求める確率が得られる．

ポテンシャル V が作用しているときは，(12-81)の S を S_V で置き換えなければならない．式は

$$\int\mathcal{D}q(t)\int\mathcal{D}q'(t)\ e^{i\{S[q(t)]-S[q'(t)]+\int dt\ q(t)V(t)-\int dt\ q'(t)V(t)\}} \tag{12-82}$$

となる．しかしポテンシャルが確率的意味においてのみ知られているものとする．すなわち，外力が $V(t)$ である確率 $P_V[V(t)]\mathcal{D}V(t)$ があるとする．このとき，ϕ から χ に到る確率はそれぞれの $V(t)$ について計算された (12-79) で与えられ，次いですべての $V(t)$ について重さ $P_V[V(t)]\mathcal{D}V(t)$ で平均する．これは次のようになる．

---

*) 以下では1自由度 q のみの場合を扱う．多自由度 q_i (したがって V もポテンシャル V_i の集合) への拡張が容易であるし，また，$V(t)$ の係数が単に q でなくもっと複雑な演算子である場合への拡張も容易である．

**) $S[q(t)]$ は実数であるとし，また11章と同様に単位系を $\hbar=1$ となるようにとる．

$$確率\,(\phi\to\chi)=\int dq_f\int dq'_f\int dq_i\int dq'_i\;\;\chi^*(q_f)\chi(q'_f)J(q_f,q'_f\,;\,q_i,q'_i)\phi(q_i)\phi^*(q'_i) \tag{12-83}$$

ここで J は (12-82) をすべての $V(t)$ について重み $P_V[V(t)]\mathcal{D}V(t)$ で平均したものである．よって

$$\begin{aligned}&J(q_f,q'_f\,;\,q_i,q'_i)\\&=\int\mathcal{D}q(t)\int\mathcal{D}q'(t)\int\mathcal{D}V(t)\;\;P_V[V(t)]e^{i[S(q(t))-S(q'(t))]}e^{i\int dt[q(t)-q'(t)]V(t)}\end{aligned} \tag{12-84}$$

ここで積分は適当な端点 $q(t_i)=q_i$，$q'(t_i)=q'_i$，$q(t_f)=q_f$，$q'(t_f)=q'_f$ の間でとる．実際，端点をこのようにとり，問題に応じて波動関数分布のさまざまな値について積分することは [(12-83) のように]，異なる端点条件について J の和をとることである．今後はこのことを忘れて，J についてすでに確率計算が行われているものとして論じる．もう少ししなければならないことがあることを思い起こすことを読者に委ねる．よって主たる問題，すなわち J を計算するのに必要な二重経路積分を評価することに集中することにする．

この形で $V(t)$ についての積分を具体的に行うことができる．平均したあとの確率を求めるために次の二重経路積分を求めなければならない．

$$J=\int\mathcal{D}q(t)\int\mathcal{D}q'(t)\;e^{i\{S[q(t)]-S[q'(t)]\}}\Phi[q(t)-q'(t)] \tag{12-85}$$

ここで $\Phi[k(t)]$ は確率分布 P_V の母汎関数である．

$$\Phi[k(t)]=\int\mathcal{D}V(t)\;P_V[V(t)]e^{i\int dt\,k(t)V(t)} \tag{12-86}$$

(12-85) は，平均ののちで正しい答えを求めるという課題に応えるものである．ここで二重経路積分を行うことが必要である．どのようにして評価したらよいかはもちろんもう 1 つの問題であるが，この本で議論してきた方法が有用であろう．以下の節でいろいろな問題がどのように定式化されるのかについてのみ議論する．

(12-85) の応用の 1 例として，$V(t)$ がガウス型雑音で，平均値が 0，(12-40) のような特性関数 $A(t,t')$ をもつものとする．次の量を評価しなければならない．

$$\begin{aligned}J=\int\mathcal{D}q(t)\int\mathcal{D}q'(t)\exp i\{S[q(t)]-S[q'(t)]\}&\\\exp\left\{-\frac{1}{2}\int dt\int dt'[q(t)-q'(t)]A(t,t')[q(t')-q'(t)]\right\}&\end{aligned} \tag{12-87}$$

少なくとも，新しい因子で q と q' は 2 次形式でのみ現れるので，2 次形式に対して

以前議論した方法が有用である．もちろん，調和振動子に対応して $S(q)$ 自体が 2 次形式ならば，3-5節の方法を用いて経路積分を厳密に評価することができる．

12-8　影響汎関数

ここで他の系と相互作用している量子力学系の振る舞いを議論する．系の一般座標を q とし，他の系の座標を Q とする*)．われわれが行う観測はすべて系 q についてのみであるとし，系 Q について直接測定は行わないものとする．たとえば，原子が電磁場の中にあって放射することができるときに，どのように遷移を起こすのかに関心がある．原子のみを調べることにし，それからくる光を直接測定しない．このとき，q は原子の座標で Q は場の座標である．別の仕方でこれを調べる場合，すなわち，原子からくる光の放射，吸収，散乱だけを調べ，原子の変数を直接含む物理量については一切問わない場合，Q を原子座標とし，q を電磁場の座標として解析を行う．たとえば，屈折率の理論が必要な場合，q は場の変数で Q は光が透過する物質の変数である．もう 1 つの例として，結晶中の電子（あるいは，液体中のイオン）の挙動を調べるとする．解析すべき測定は直接的に電荷の位置だけであり，結晶の物質ではない．たとえば，ある環境の中で発生した電流（電子速度）を知りたいとする．しかし，発生した光子数との相関を考えないとする．このとき，q は電子の座標であり，Q は結晶物質の座標である．

$S[q(t)]$ を系 q の作用関数とし，$S_0[Q(t)]$ を環境系のみの作用関数とする．$S_i[q(t), Q(t)]$ を環境系 Q と関心のある系 q の間の相互作用の作用関数とする．結合系の作用関数は $S[q(t)]+S_0[Q(t)]+S_i[q(t), Q(t)]$ である．結合系に起こる任意の事象の確率は二重経路積分より評価される．これは（12-81）の明白な一般化で，次のように表される．

$$J=\int\mathcal{D}q(t)\int\mathcal{D}q'(t)\int\mathcal{D}Q(t)\int\mathcal{D}Q'(t)\exp(i\{S[q(t)]-S[q'(t)] + S_i[q(t), Q(t)]-S_i[q'(t), Q'(t)]+S_0[Q(t)]-S_0[Q'(t)]\}) \tag{12-88}$$

しかし，$Q(t)$ についての測定を必要とせず，$q(t)$ への依存性のみを調べる必要がある場合には，答えを次のように書くことができる．

---

*）　Q は任意の数の自由度を表す．一般に，系 Q が非常に複雑な系の場合もある．1 変数 Q を用いるが本質的なことは失われない．

$$J=\int\mathcal{D}q(t)\int\mathcal{D}q'(t)\ e^{i\{S[q(t)]-S[q'(t)]\}}F[q(t),q'(t)] \tag{12-89}$$

ここで汎関数 $F[q(t),q'(t)]$ を**影響汎関数**と呼ぶ．これは 2 つの関数 $q(t)$ と $q'(t)$ の汎関数である．この特殊な問題に対しては

$$F[q(t),q'(t)]=\sum_f\int\mathcal{D}Q(t)\int\mathcal{D}Q'(t)\exp(i\{S_0[Q(t)]-S_0[Q'(t)] + S_i[q(t),Q(t)]-S_i[q'(t),Q'(t)]\}) \tag{12-90}$$

で与えられる．

f についての和は Q の可能なすべての終状態 f について和をとることを意味する．これは，Q について測定をしないので環境のあらゆる終状態が可能であるからである．したがって，すべての確率［(12-88) の J 関数］を足し合わせなければならない．たとえば，座標表示で $\sum_f$ の意味は，注目する相互作用が終わったあとの終わりの時刻 t_f において $Q(t_f)=Q'(t_f)=Q_f$ とおき，すべての Q_f について積分することである．

要約すると，環境中の系の振る舞いは (12-89) のような二重経路積分を用いて議論される．ここで，F は環境の性質すなわち，系に対する「影響」である．これは $q(t)$ に関連する環境の性質をまとめて表したものである．2 つの異なる可能な環境条件 A，B が物理的に非常に異なる仕方で構成されたとしても，もし，それらが同じ汎関数 F を与える場合，q 系の振る舞いに関するかぎり，それらを区別することができない．

この F は，相互作用している系の振る舞いを古典的に分離するときに「外場」を用いることと類似している．環境によってどのような力が発生するかを（時間の関数として）知っているならば，q の運動だけを解析することができる．q のみの Newton の運動方程式は大ざっぱにいって (12-89) に類似している．また，(12-90) は与えられた環境によって発生した力を計算することに対応している．q に対して同じ力を発生する 2 つの異なる環境は等価である．しかし，「外場」との類似性は近似的なものにすぎない．なぜなら，F は環境の効果を全部含んでおり，その中には q との作用の結果生じた環境の振る舞いの変化も含まれているからである．古典論の類似として，影響汎関数 F は，力を時間の関数として知ることだけでなく，物体の可能なそれぞれの運動 $q(t)$ に対して力がどのようなものかを知ることに対応する．たしかに，与えられた環境系の力は一般に $q(t)$ に依存する．なぜなら，環境系

は注目する系 q との相互作用によって影響を受けるからである．

したがって，以下で影響汎関数の性質を調べることにしよう．いくつかの規則を羅列し，それらがどのようにして導かれたかについて示唆することに留めておく．

規則 I

$$F[q(t), q'(t)]^* = F[q'(t), q(t)] \tag{12-91}$$

ここで星印は複素共役を表す．

規則 II　任意の値 a を超える t に対して，関数 $q(t)$ と $q'(t)$ を等しいとおくと，F は $t>a$ における $q(t)$ の実際の値に依存しない．

規則 III　F_i がある特定の環境 i についての影響汎関数であり，実際の環境はどれかがわからず，環境 i が存在する確率が ω_i であるということだけがわかっている場合，有効影響汎関数（すべての確率を計算するための）は

$$F = \sum_i \omega_i F_i \tag{12-92}$$

である．

規則 IV　系 q が同時に 2 つの外系 A, B と相互作用しているとする．A と B が互いに直接相互作用していなくて，初期条件において A と B の間に相関がないとすると，

$$F = F_A \cdot F_B \tag{12-93}$$

である．ここで F_A は A のみが相互作用している場合の影響汎関数であり，F_B は B のみが相互作用している場合の影響汎関数である．

規則 V　汎関数 F が

$$F = \exp\left\{i\int dt\ [q(t) - q'(t)]\, V(t)\right\} \tag{12-94}$$

によってよく近似できるものとすると，系 q は古典的力 $V(t)$ の下にあるように振る舞い，その作用は $\int dt\ q(t)\, V(t)$ である．もし，これが $F(q, q') = \Phi[q(t) - q'(t)]$ という形ならば［ただし，$\Phi[k(t)]$ は任意の汎関数］，環境は古典的な不確定な力 $V(t)$ と等価である．［Φ は $V(t)$ の分布に対する特性汎関数である．］

規則 I が正しいことは (12-90) から直ちに明らかである．この式は規則 II の説明も与えるが，もっと微妙である．任意の確定した作用 $S_a(Q)$ と任意に与えられた初期状態をもつ系に対して

$$\sum_f \int \mathcal{D}Q(t) \int \mathcal{D}Q'(t)\, e^{i\{S_a[Q(t)]-S_a[Q'(t)]\}} = 1 \tag{12-95}$$

となる．その理由は，積分と終状態についての和 $\sum_f$ が（4-37）により

$$\int dQ_f\, K(Q_f, t_f\,;\, Q_i, t_i)K^*(Q_f, t_f\,;\, Q_i', t_i) = \delta(Q_i - Q_i') \tag{12-96}$$

と等価であるからである．よって初期波動関数が $\phi(Q_i)$ ならば，（12-79）でしたように $\phi(Q_i)\phi^*(Q_i)$ を掛けて積分すると

$$\int dQ_i \int dQ_i'\, \phi(Q_i)\phi^*(Q_i')\delta(Q_i - Q_i') = \int dQ|\phi(Q)|^2 = 1 \tag{12-97}$$

が得られる．ここで次のことに注意する．(12-90) においてすべての時刻で $q'(t)=q(t)$ とおくと，(12-95) のような式が得られ，そこで $Q(t)$ に対する有効（かつ確定的）作用は

$$S_a[Q(t)] = S_0[Q(t)] + S_i[q(t), Q(t)]$$

かつ

$$S_a[Q'(t)] = S_0[Q'(t)] + S_i[q(t), Q'(t)]$$

である．これは $q'(t)=q(t)$ とおくかぎり，必然的である．よって $F[q(t), q(t)]=1$ である．

同様の議論を時間領域 $a<t<t_f$ に限定し，（12-96）のような関係（ただし，t_i, Q_i を a, Q_a で置き換える）を用いると，次のことがわかる．$t>a$ に対して $q(t)=q'(t)$ ならば，F は $t>a$ における $q(t)$ に依存しない．なぜなら，(12-96)の右辺は $t>a$ における $q(t)$ に依存しないからである．

規則IIIは確率が J の値をさまざまな環境について足し合わせることによって求められるということから明らかな結果である．

規則IVは（12-90）より明らかである．規則の条件より，（12-90）に入る作用が $S_{0A}[Q_A(t)] + S_{iA}[q(t), Q_A(t)] + S_{0B}[Q_B(t)] + S_{iB}[q(t), Q_B(t)]$ であり，この和の指数関数は積で表される．さらに初期状態が波動関数の積であるとすれば，積分Fも積の形に書けるということを理解すればよい．

規則Vは（12-82）と（12-85）に示した結果を述べたまでのことである．

これらは影響汎関数の一般的性質の主要なものであるが，影響汎関数を計算する際には，（12-89）の中の経路積分を行うさまざまな方法が必要となる．この節の結びとしていくつかの重要な影響汎関数を議論する．

ガウス型確率分布やガウス型雑音分布が簡単で重要であるように，$q(t)$，$q'(t)$ の2次形式の指数関数の形をしている影響汎関数も特に重要である．これをガウス型影響汎関数と呼ぶ．

まず，環境が1組の調和振動子からなり基底状態にある（あるいは，与えられた温度をもっている）とする．そして興味ある系 q と1次の結合をしている．この場合，(12-90) を評価すると，Fがガウス型であることがわかる．しかしガウス型影響汎関数はガウス型確率と同様によい近似としてもっと広い範囲の状況で起こる．すなわち，1つ1つの影響は小さな効果しか与えないがそれらの影響が多数集まった結果，その分布はガウス型となる．たとえば，環境の多数の気体原子のそれぞれと弱い相互作用をしている原子を考えよう．1つの原子 A の影響は非常に小さいので，その影響汎関数 F_A は1からわずかに外れているだけである．しかしながら，規則IVによると，完全なFは多くの因子の積である．それは，それぞれからの小さい寄与の和の指数関数にほぼなっている．この寄与を各々の原子との相互作用について1次と2次の展開をすると，ガウス型の影響汎関数が得られる．

この結論の応用の1つとして，空洞共振器の中に置かれた金属片が共振器に及ぼす影響は，金属中の多数の電子が複雑に運動しているにもかかわらず，単純な線形であって，1つのインピーダンス関数で表される．空洞振動子(q)に対する金属(Q)の影響汎関数はほとんどガウス型で，この点では金属は調和振動子の集まりと等価であり同じ影響汎関数を与えるのである．

$q(t)$ と $q(t')$ を線形で含むもっとも一般的な指数汎関数は，任意の複素数 $V(t)$，$U(t)$ に対して

$$F[q(t),\ q'(t)]=\exp\left[i\int dt\ q(t)V(t)-i\int dt\ q'(t)U(t)\right] \qquad (12\text{-}98)$$

という形である．しかしながら，これが影響汎関数であるためには，5つの規則の条件を満たさなければならない．規則Ⅰは $U(t)=V^*(t)$ を要請する．規則IIは $U(t)=V(t)$ を意味する．よって U と V は等しく V は実数である．よってもっとも一般的な線形汎関数は，規則Vにより古典的外場ポテンシャルの作用と等価である．

この単純な場合についてこれ以上議論する必要はない．なぜなら，非摂動問題のハミルトニアンに $q(t)V(t)$ を加えさえすれば完全に解析が可能であるからである．指数部分が2次と1次の項をもつならば，変数変換により1次の項を消去することができる．よって規則IVより，これは古典的ポテンシャルと純粋に2次の汎関数の

効果を加えたものであるとみなせる．

純粋に2次の項だけを含む指数汎関数のもっとも一般的な形は次のようになる．

$$F[q(t),\ q'(t)]=\exp\Big\{-\int dt\int^{t}dt'\,[\alpha(t,t')q(t)q(t')+\beta(t,t')q'(t)q'(t')$$
$$+\gamma(t,t')q(t)q'(t')+\delta(t,t')q'(t)q(t')]\Big\} \qquad (12\text{-}99)$$

ここで α，β，γ，δ は任意の複素数である*．t，t' の積分は問題とする時間の全範囲について行うが常に $t>t'$ となるようにとる．もちろん，これによって一般性が失われることはない．後の解析にとってこのほうが便利である．(12-99) が満足できる影響汎関数であるために規則 I より次の2つの式が成り立たなければならない．

$$\beta(t,t')=d^*(t,t') \qquad (12\text{-}100)$$

$$\gamma(t,t')=\delta^*(t,t') \qquad (12\text{-}101)$$

規則IIより多くの情報が得られる．$t>a$ において $q(t)=q'(t)$ とおく．$t>a$，$t'<a$ を仮定すると，次の式［これは (12-99) の積分の一部分である］

$$\int_a dt\int^{a}dt'[\alpha(t,t')q(t)q(t')+\beta(t,t')q(t)q'(t')$$
$$+\gamma(t,t')q(t)q'(t')+\delta(t,t')q(t)q(t')] \qquad (12\text{-}102)$$

は任意の $q(t')$ に対して $t>a$ における $q(t)$ に依存しない．また $t'<a$ における $q'(t')$ にも依存しない．このことから $t>a$，$t'<a$ であるかぎり次の関係式が必要となる．

$$\delta(t,\ t')=-\alpha(t,\ t')$$
$$\gamma(t,\ t')=-\beta(t,\ t') \qquad (12\text{-}103)$$

しかし a は任意であるから，(12-103) はすべての t，t'（$t>t'$ の条件の下に）に対して成り立つ．

したがってもっとも一般的なガウス型影響汎関数はただ1つの複素数関数 $\alpha(t,t')$ に依存し次のような形になる．

$$\exp\Big\{-\int dt\int^{t}dt'\,[q(t)-q(t')][q(t')\alpha(t,t')-q'(t')\alpha^*(t,t')]\Big\} \qquad (12\text{-}104)$$

$\alpha(t,t')$ が実数 $A(t,t')$ の場合，汎関数は(12-87)の指数部分と等価になる．古典的雑音の摂動と同じものが得られる．一般的に，量子力学系で α は複素数である．重要な特殊例の1つは $\alpha(t,t')=\alpha(t-t')$ が時間差 $t-t'$ のみに依存する場合である．この場

---

*）これらの関数は $t>t'$ に対してのみ定義される．

合，環境系の平均的性質は時間の絶対値に依存しない．

(12-104)の性質のうちのいくつかを理解するために，q 系が時間間隔 T の間にエネルギー準位 n から他の直交する準位 m に遷移する確率を求める．ただし α が非常に小さく摂動論を使える場合を考える．(12-104)の F を展開すると最大項 1 はなにも与えない．なぜなら状態は直交しているからである．α に線形の項は 4 つの部分からなる． 1 つは $-\int dt\int^{t}dt'\ \alpha(t,t')q(t)q(t')$ である．これを (12-89) に F の代わりに入れて，(12-83)で $\phi=\phi_n$，$\chi=\phi_m$ とおいて評価すると，$\mathcal{D}q(t)$ と $\mathcal{D}q(t')$ についての積分は 2 つの因子の積であることがわかる．まず，q の積分は

$$\int\mathcal{D}q(t)\ e^{iS[q]}\left[-\int dt\int^{t}dt'\ \alpha(t,t')q(t)q(t')\right]$$

であり，これは次の遷移要素を与える（第 7 章を参照）．

$$\langle m|-\int dt\int^{t}dt'\alpha(t,t')q(t)q(t')|n\rangle=-\int dt\int^{t}dt'\langle m|q(t)q(t')|n\rangle\alpha(t,t') \quad (12\text{-}105)$$

$\mathcal{D}q'$ の積分は $\int\mathcal{D}q'(t)e^{iS[q']}$ だけであり，遷移要素 $\langle m|1|n\rangle$ の複素共役を与える．他の項も同様に解析すると，全遷移確率は

$$\begin{aligned}P(n\to m)=\int dt\int^{t}dt'\ [&-\alpha(t,t')\langle m|q(t)q(t')|n\rangle\langle m|1|n\rangle^{*}\\&-\alpha^{*}(t,t')\langle m|1|n\rangle\langle m|q(t)q(t')|n\rangle^{*}+\alpha^{*}(t,t')\langle m|q(t)\rangle|n\rangle\langle m|q(t')|n\rangle^{*}\\&+\alpha(t,t')\langle m|q(t)\rangle|n\rangle^{*}\langle m|q(t')|n\rangle\end{aligned} \quad (12\text{-}106)$$

となる．m と n が直交しているならば，$\langle m|1|n\rangle=0$ である．作用 $S[q]$ が，状態 k でエネルギー準位 E_k をもつ時間によらないハミルトニアンからなるものであれば，

$$\langle m|q(t)|n\rangle q(t)|n\rangle=q_{mn}\ e^{-i(E_m-E_n)t} \quad (12\text{-}107)$$

である．(12-106)の最後の 2 項のみが残り，それらは互いに複素共役である．よって

$$P(n\to m)=2\mathrm{Re}\left\{\int dt\int^{t}dt'\ \alpha(t,t')|q_{nm}|^{2}e^{-i(E_m-E_n)(t-t')}\right\} \quad (12\text{-}108)$$

問題12- 3　$m=n$ に対して $P(m\to m)=1-\sum_{n}P(m\to n)$ を確かめよ．これは確率保存によって要請される．

時間的に定常な環境の場合，$\alpha(t,\ t')=\alpha(t-t')$ である．フーリエ変換を次のように定義する．

$$a(\nu)=\int_0^\infty d\tau\ \alpha(\tau)e^{-i\nu\tau} \tag{12-109}$$

$\alpha(t)$ は $t<0$ で定義されない．(12-108) の $P(n\to m)$ は積分の時間区間に比例するから，毎秒当たりの遷移確率を定義することができる．遷移確率は

$$\text{毎秒当たりの } P(n\to m)=2a_R(E_m-E_n)|q_{nm}|^2 \tag{12-110}$$

であることがわかる．ここで $a(\nu)$ を実数部と虚数部に分けた．

$$a(\nu)=a_R(\nu)+ia_I(\nu) \tag{12-111}$$

ガウス型雑音の下で古典的ポテンシャルによって攪乱される場合，$\alpha(\tau)$ は実数で［(12-87) を参照］，$a(\nu)$ の実数部は (12-32) で定義されたような雑音のパワースペクトル関数である．したがって，このような古典的雑音の系に対して，

$$a_R(\nu)=a_R(-\nu) \tag{12-112}$$

であり，摂動の 1 次で

$$n\to m \text{ の遷移確率 } = m\to n \text{ の遷移確率} \tag{12-113}$$

となる．両辺の遷移確率は遷移の振動数におけるパワー $P(\omega)$ に比例する．よって古典的ポテンシャルは同じ確率で上向きと下向きの遷移を引き起こす．

もう 1 つのおもしろい例は，環境が十分な確率でエネルギーを供給することができない場合である．たとえば，環境が初期に基底状態（すなわち，絶対零度）にある場合である．このような環境を「冷たい」と呼ぶことにする．このような状況では，系 q がエネルギーの高い状態 $(E_m>E_n)$ に遷移することは起こり得ない．したがって，このような**冷たい環境**では，

$$\nu>0 \text{ に対して } a_R(\nu)=0 \tag{12-114}$$

であり，摂動の 1 次で

$$E_m>E_n \text{ に対して } n\to m \text{ の遷移確率 } =0 \tag{12-115}$$

となる．

任意の $a(\nu)$ は，(12-112)に示されたタイプと (12-114) で示されたタイプとの和として表されるから，時間に依存しないガウス型汎関数は，冷たい環境中でガウス型の式で表される揺動古典ポテンシャルの作用を受けている系と等価であることは明らかである．この結論は，2 つのガウス型関数の積もまたガウス型であるという事実と規則IVから導かれる．1 つの環境が系に及ぼす作用を (12-87) の方法に従っ

て $A_1(t, t')$ と表し，他の環境の作用を $A_2(t, t')$ と表す．その結果のガウス型汎関数に現れる相互作用項は A_1+A_2 である．

12-9　調和振動子からの影響汎関数

座標 Q で記述され基底状態にある調和振動子からなる環境が線形に q と結合している場合，(12-90) から F を求める方法の例を示す．このとき，相互作用を $S_{int}(q, Q)=C\int q(t)Q(t)dt$ とする．振動子の質量を1とし，振動数を ω とすると，

$$S_0(Q)=\frac{1}{2}\int dt\ [\dot{Q}(t)^2-\omega^2 Q(t)^2] \tag{12-116}$$

である．このとき

$$\begin{aligned}F[q(t), q'(t)]=&\sum_m \int \mathcal{D}Q(t)\int \mathcal{D}Q'(t)\exp\left\{i\int dt\left[\frac{1}{2}\dot{Q}(t)^2-\frac{\omega^2}{2}Q(t)^2\right.\right.\\&\left.\left.+Cq(t)Q(t)\right]\right\}\exp\left\{-i\int dt\left[\frac{1}{2}\dot{Q}'(t)^2-\frac{\omega^2}{2}Q'(t)^2\right.\right.\\&\left.\left.+Cq'(t)Q'(t)\right]\right\}\end{aligned} \tag{12-117}$$

となる．ここで，m は終状態で初期状態は基底状態である．Q の積分は明らかにガウス型であり，実際すでに行った．なぜなら，これは，強制調和振動子について8-9節で求めた遷移振幅 G_{m0} そのものである．そこで $\gamma(t)$ と表した強制関数はここでは $-Cq(t)$ である*．よって (8-145) で $n=0$ とおいて得られる．

$$G_{m0}=(m!)^{-\frac{1}{2}}(i\beta^*)^m G_{00} \tag{12-118}$$

G_{00} は (8-138) で与えられ，β は (8-143) において γ を $-Cq(t)$ で置き換えたものである．同様に Q' についての積分は同様な式の複素共役であり，γ を $-Cq'(t)$ で置き換えたものである．以下で q の代わりに q' を代入して得られる関数はダッシュ記

---

*）(12-117) を次のように表すこともできる．

$$F[q(t),\ q'(t)]=\int dQ_f\int dQ_i\int dQ'_i\ K(Q_f, t_f\ ;\ Q_i, t_i)K'^*(Q_f, t_f\ ;\ Q'_i, t_i)\phi_0(Q_i)\phi_0^*(Q'_i)$$

ここで K は外力 $f(t)=Cq(t)$ による強制調和振動に対する核[(3-66)]であり，K' は外力 $f(t)=Cq'(t)$ に対する核である．$\phi_0(Q)$ は基底状態にある振動子の波動関数である．Q_i, Q'_i, Q_f はすべてガウス関数として現れるので容易に積分できる．有限温度の場合についても，同様に容易に計算することができる．その場合，n は初期状態で $e^{-\beta E_n}$ に比例する確率をもつ．したがって，規則IIIにより，上記 F における波動関数 $\phi_0(Q_i)\phi_0^*(Q'_i)$ を

$$(\text{定数})\sum_n \phi_n(Q_i)\phi_n^*(Q'_i)e^{-\beta E_n}$$

で置き換えることにより，影響汎関数が得られる．これは，問題10-1で求めた密度行列 $\rho(Q_i, Q'_i)$ を用いることに相当する．積分はガウス型である．

号で表す．(12-117) において終状態に関する和をとると，

$$F(q,q')=\sum_m G_{m0}G'^*_{m0}=\sum_m (m!)^{-\frac{1}{2}}(i\beta^*)^m G_{00}(m!)^{-\frac{1}{2}}(-i\beta')^m G'_{00}=G_{00}G'_{00}e^{\beta^*\beta'} \tag{12-119}$$

が得られる．(8-138) と (8-143) を代入すると，期待されたように，(12-104) の形の F が得られ，

$$\alpha(t,t')=\frac{C^2}{2\omega}e^{-i\omega(t-t')} \tag{12-120}$$

とおいたものになっている．たとえば，(12-104) の qq' の項は指数部分の $\beta^*\beta'$ から直接来たものである．実際，(8-143) よりこの積は

$$\frac{C^2}{2\omega}\left[\int dt\ q(t)e^{i\omega t}\right]\left[\int dt\ q'(t)e^{-i\omega t}\right]=\frac{C^2}{2\omega}\int dt\int^t dt'\ [q(t)q'(t')e^{i\omega(t-t')} + q'(t)q(t')e^{-i\omega(t-t')}] \tag{12-121}$$

となる．したがって (12-109) で定義された量 $a(\nu)$ は次のようになる［(5-17) と付録を参照］．

$$a(\nu)=\frac{C^2}{2\omega}\int_0^\infty dte^{-i\omega t}e^{-i\nu t}=\frac{C^2}{2\omega}\left[-i\mathrm{P.P.}\frac{1}{\omega+\nu}+\pi\delta(\omega+\nu)\right] \tag{12-122}$$

よって $a(\nu)$ の実数部は

$$a_R(\nu)=\frac{\pi C^2}{2\omega}\delta(\omega+\nu) \tag{12-123}$$

である．これは正の ν に対して 0 である．期待されたように，(12-114) で示した「冷たい環境」が得られた．

異なる振動数をもつ多くの独立な振動子が作用している場合，規則IVより $a_R(\nu)$ 関数は足し合わさる．したがって，任意の冷たい系は（ガウス型の近似で）基底状態にある連続無限個の振動子と等価である．その理由は，負の ν に対してどの関数 $a_R(\nu)$ も (12-123) の形のデルタ関数となるからである．

もう 1 つの興味ある例は，有限温度にある 1 つの振動子と相互作用する場合である．温度を T とすると，初期状態が状態 n である確率は $e^{-E_n/kT}$ に比例する．ここでの目的のために，絶対確率（規格化された確率）を求めると，

$$w_n=e^{-n\hbar\omega/kT}(1-e^{-\hbar\omega/kT}) \tag{12-124}$$

である．初期状態が n ならば，影響汎関数は (12-119) の代わりに

$$F_n=\sum_m G_{mn}G'^*_{mn} \tag{12-125}$$

となる．規則IIIを用いて，確率 w_n を掛けて和をとると，最終結果 F は，

$$F=\sum_{m,n} G_{mn}G'^{*}_{mn}e^{-n\hbar\omega/kT}(1-e^{-\hbar\omega/kT}) \tag{12-126}$$

となる．和を（8-145）から直接求めるのは困難であるが，

$$F=G_{00}G'^{*}_{00}e^{\beta^*\beta'}\exp\left[-\frac{(\beta-\beta')(\beta^*-\beta'^*)}{e^{\hbar\omega/kT}-1}\right] \tag{12-127}$$

となる．

この結果，$a_R(\nu)$ は（12-123）の代わりに

$$a_R(\nu)=\frac{\pi C^2}{2\omega}\left[\frac{e^{\hbar\omega/kT}}{e^{\hbar\omega/kT}-1}\delta(\omega+\nu)+\frac{1}{e^{\hbar\omega/kT}-1}\delta(\omega-\nu)\right] \tag{12-128}$$

となり，多くの振動子に対する同様の式を足し合わせると環境の効果が表現される．このとき，エネルギーの高いほうにも低いほう（$\omega<0$）にも遷移が起こりうる．

次のことに注意しよう．$\nu>0$ ならば，最初のデルタ関数は 0 となる．一方 $\nu<0$ ならば，2 番目のデルタ関数が 0 となる．また

$$a_R(-|\nu|)=e^{\hbar|\nu|/kT}a_R(+|\nu|) \tag{12-129}$$

である．この確立した関係式の意味は，摂動論において $E_n>E_m$ ならば，（12-110）より

$$\frac{\text{毎秒当たり } m\to n \text{ の遷移の起こる確率}}{\text{毎秒当たり } n\to m \text{ の遷移の起こる確率}}=e^{-(E_n-E_m)/kT} \tag{12-130}$$

であるということである．

よって系 q が相対確率 $e^{-E_n/kT}$ で状態 n を占有しているとき，上向きと下向きの遷移はつり合っていて，環境との弱い摂動に対して統計平衡にある．温度 T にある環境で 2 次の影響汎関数を与えるものは，すべて（12-129）の性質をもつ．

系 q として 1 つの原子を考え，環境として温度 T の電磁場を考えると，$a_R(\nu)$ は（12-128）のような式をさまざまな振動数 ω の場のモードについて積分したものである．それは（12-123）の冷たい環境と雑音の外場とに分解できる．

$$a_R(\nu)=\frac{\pi C^2}{2\omega}\delta(\omega+\nu)+\frac{1}{e^{\hbar\omega/kT}-1}\frac{\pi C^2}{2\omega}[\delta(\omega+\nu)-\delta(\omega-\nu)] \tag{12-131}$$

最初の項はエネルギーが減少する遷移を与え，自発的放出と呼ばれる．第 2 項はエネルギーの減少と増大を同じ容易さで起こす．これを誘導放出や誘導吸収と呼ぶ．この遷移は外場や雑音によって引き起こされると考えられる．振動数 ν における攪乱強度の 2 乗平均は $1/(e^{\hbar\omega/kT}-1)$ のように温度変化する．このようにして Einstein は最初に黒体輻射の法則を議論したのである．ここでわかったように，温度 T で 2

次形式の影響汎関数を与える環境（線形に応答する環境であるという）は同じようにして扱えるのである．多くの人たちが Einstein の議論を他の系に拡張した．たとえば，温度 T にある抵抗器における電圧揺動の雑音など．第1項はエネルギーが系 q から一方的に出て行く速度を表す．すなわち環境によって生じる「散逸」の大きさ（たとえば，金属の電気抵抗，電磁場の放射抵抗など）を示す．温度 T において，散逸の他に環境によって生じる雑音信号があり，各々の振動数の雑音の2乗平均はその振動数の散逸に $(e^{\hbar\omega/kT}-1)^{-1}$ を掛けたものとみなせるのである．これを**散逸揺動定理**と呼ぶ．

この話題をこれ以上追求しない*)．

12-10　結　　び

経路積分を確率論に応用する際に，被積分関数がガウス型であるならば，技巧をかなり用いることができる．しかし，そのような問題はまさに経路積分を必要としない他の方法でも解くことのできる問題である．経路積分の真の有用性を疑問とすることは正当性をもつ．これに対しては次のようにいうことができるだけである．つまり，問題がガウス型でないときは，少なくとも経路積分で定式化でき研究することができる．もし将来解析の技術が改良されれば，もっと多くのことができることが期待されよう．経路積分によって得られる結果でもっと伝統的な方法によっては簡単に得られないものの唯一の例は，第11章で論じた変分原理である．この方法をもっと研究すれば，もっと多くの結果が得られるものと期待される．

しかしながら，次のことを指摘しておくことは，価値がある．経路積分は，問題の1つの定式化から他の定式化へと速やかに変換することを可能にし，しばしば関係式を明瞭にかつ速やかに与える．そのような関係式をもっと通常の方法で導こうとすると時間がかかる場合がある．

量子力学への応用については，経路積分は致命的な欠陥をもつ．スピン演算子や他の同様な演算子を単純明瞭に議論できない．座標と運動量が系を記述するのにふさわしい場合に最大有効である．しかしながら，スピンは単純ながら，現実の量子

*）影響汎関数については，以下の論文で詳しく論じられている．R.P. Feynman and F.L. Vernon, Jr., *Ann. Phys.* (N.Y.) **24** 118 (1963)；W.H. Wells, *Ann. Phys.* (N.Y.) **12** 1 (1961)．ポーラロンの易動度の計算への応用は，R.P. Feynman, R.W. Hellwarth, C.K. Iddings and P.M. Platzmann, *Phys. Rev.* **127** 1004 (1962)．

力学系にとって本質的部分である．電子の半整数スピンに対して単純かつ直接的な表現がないことは致命的な限界である．振幅と物理量が通常の複素数でなくクオータニオンであるとみなせば，スピンを扱うことができる．しかし，そのような数は可換でないので非常に複雑になる．

しかしながら,. 経路積分の結果と定式化の多くは他の数学体系（ある種の演算子法）によって表現できる*)．この形式では，前の各章の多くの結果が，非可換変数を扱う場合へとさらに一般化されている（第11章の特殊な問題については，一般化が知られていない)．たとえば，影響汎関数を議論するこの章で，座標 q にではなくスピンのような非可換演算子に結合した環境が重要な興味ある一般化であるということは読者にとって驚きであろう．そのようなことは経路積分の定式化の中で便利な形に表せない．むしろ密接に関係した演算子法で容易に表せる．

現在の限界を超えて経路積分の方法を拡張する努力を今後も続けていく必要がある．この方法には限界があるにもかかわらず，最大の価値が存在する．それは物理的洞察と数学的解析とを結び付ける際に，われわれの直観を助けてくれるからである．

---

*) R.P. Feynman, An Operator Calculus Having Applications in Quantum Electrodynamics, *Phys. Rev.* **84** 108 (1951).

付録：役に立つ定積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ax^2+bx}\,dx = \sqrt{\frac{\pi}{-a}}\,e^{-b^2/4a}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{a(x_1-x)^2}e^{b(x_2-x)^2}\,dx = \sqrt{\frac{-\pi}{a+b}}\exp\left[\frac{ab}{a+b}(x_1-x_2)^2\right]$$

$$\int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{a}{x^2}-bx^2\right)dx = \sqrt{\frac{\pi}{4b}}\exp\left(-2\sqrt{ab}\right)$$

$$\int_0^{T} \exp\left(-\frac{a}{T-\tau}-\frac{b}{\tau}\right)\frac{d\tau}{\sqrt{(T-\tau)\tau^3}} = \exp\frac{[-(1/T)(\sqrt{a}+\sqrt{b})^2]}{\sqrt{bT/\pi}}$$

$$\int_0^{T} \exp\left(-\frac{a}{T-\tau}-\frac{b}{\tau}\right)\frac{d\tau}{[\sqrt{(T-\tau)\tau}]^3}$$

$$= \sqrt{\frac{\pi}{T^3}}\,\frac{\sqrt{a}+\sqrt{b}}{\sqrt{ab}}\exp\left[-\frac{1}{T}(\sqrt{a}+\sqrt{b})^2\right]$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}\,dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\int_0^{\pi/2} e^{-q\sin x}\sin 2x\,dx = \frac{2}{q^2}[(q-1)e^q+1]$$

$$\left.\begin{aligned}&\int_0^{\pi} e^{p\cos x}\sin(p\sin x)\sin ax\,dx\\ &\int_0^{\pi} e^{p\cos x}\cos(p\sin x)\cos ax\,dx\end{aligned}\right\} = \frac{\pi p^a}{2a!}$$

$$\int_0^{\infty} e^{-\lambda x^m}x^k\,dx = \frac{1}{m}\lambda^{-(k+1)/m}\Gamma\left(\frac{k+1}{m}\right)$$

訳者あとがき

本書の翻訳の依頼を受けたのは1986年の夏頃であった．当初2年位で仕上げる予定でいたが，予期しなかったことが多々身辺におこり，その度に筆が中断して，今日まで遅れてしまったことをお詫びしたい．何事にもまして，Feynman教授が他界される前に完了しなかったことが悔やまれる．

原著は1965年出版されて以来，よく読まれている本で今さら翻訳を，という気もしないではないが，特に現在，観測の問題など量子力学の基本的な問題が実際の実験上重要となってきていることなどを考えると，本書が特に若い人々に読み易い形で翻訳されることに意味があるように思う．また，原著には印刷ミスが多いので，翻訳にあたってできる限り訂正したつもりである．まだ不完全であったらお許し願いたい．

経路積分は，量子力学を古典的経路（軌道）の概念で定式化したもので，$\hbar \to 0$ で古典力学のLagrange方程式が導かれるのは，何といっても印象的である．実際，経路積分の方法は $\hbar \to 0$ における半古典近似，また変分法（ポーラロン問題）などにおいて特に威力を発揮する．半古典近似は，化学反応の衝突理論で随分使われた[1]．また，軌道の概念を使うため，幾何学的拘束条件を導入しやすいという利点もある．これは高分子の絡み合いの問題に拡張された[2]．

経路積分は，場の理論の基礎をなすもので，それぞれの分野で多数の本が出版されているが，非常に基本的な概念について，よく現状をまとめている本としてSchulman[3]の本を勧めたい．さらに，昨年（1989年）BangkogでFeynman教授追悼の国際会議「Path Integrals from meV to MeV」が開催された．その会議録[4]は経路積分法の研究の現状を知る上で参考となろう．

最後に，藤村行俊氏とマグロウヒル出版編集部の杉谷繁氏の励ましと寛容に心から感謝申しあげたい．

1990年5月　西ドイツユーリッヒ研究所にて　　　　北原　和夫

文　　献

(1) W.H. Miller, *Adv. Chem. Phys.* **25** 69 (1974) ; **30** 77 (1975).

(2) S.F. Edwards, *Proc. Phys. Soc.* **91** 513 (1967) ; *J. Phys.* **A1** 15 (1968).

(3) L.S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integrals* (Wiley, New York, 1981).

(4) V. Sa-yakanit et al. (Eds), *Third International Conference on Path Integrals from meV to MeV* (World Scientific, Singapore, 1989).

新版へのあとがき

この本の原書 *Quantum Mechanics and Path Integrals* を初めて手にしたのは修士課程 1 年生の頃である．研究室の輪講で Edwards の乱流の論文を紹介することになり，その引用文献として読むことになった．いろいろな経路について足し合わせる，という考え方で古典力学の変分原理の意味が量子力学の観点から明らかになり，感動したことを憶えている．この考え方が，その後博士論文の研究テーマとして，非線形系の揺らぎを扱うときに非常に役に立った．揺らぎを確率過程としたときに，揺らぎが小さい極限と量子力学における半古典近似とはよく対応している．また，後に，結晶の転位による電子の散乱の問題を考えたときにも，歪んだ空間における経路積分の問題として捉えることによって，見通しのよい定式化を作ることができた．そんなことで，本書の翻訳を引き受けることになった次第である．

本訳書は 1990 年にマグロウヒル社から刊行され，多くの読者から内容についてのコメントを含めて反響を頂いた．あいにくなことに，昨年出版社の事情で絶版となった．

今回，みすず書房から復刊されることになり，再び若い読者の手に渡ることができるようになって嬉しく思っている．

経路積分は，場の理論の基礎をなす概念であるが，統計物理学，流体力学，高分子物理学，格子欠陥などに広く用いられ，最近では計算機によって経路積分そのものの計算も行なわれてきている．数学的には収束性の問題などまだ不明なことも多い．

本書が広い分野の若い人々に，ファインマンの深い洞察を伝えることができれば幸いである．

1995 年 3 月

北原　和夫

索　引

さ　行

た 行

な 行

は 行

ま　行

や　行

ら　行

わ　行

著者略歴

(Richard P. Feynman, 1918-1988)

ニューヨーク市に生まれる．1939年マサチューセッツ工科大学卒業．プリンストン大学大学院に学び，1942年ホィーラー教授の下で博士号を取得．その後，原爆開発のマンハッタン計画に参加．1945-50年コーネル大学助教授．1950年以後はカリフォルニア工科大学教授．1965年，量子電磁力学の構成の業績で，シュヴィンガー，朝永振一郎と共にノーベル物理学賞を受賞．『物理法則はいかにして発見されたか』（ダイヤモンド社）『光と物質のふしぎな理論 —— 私の量子電磁力学』『ご冗談でしょう，ファインマンさん —— ノーベル賞物理学者の自伝』（いずれも岩波書店）など一般向けの著作や，学部学生向けの教科書『ファインマン物理学』（岩波書店）で多くの読者に親しまれている．

(Albert R. Hibbs)

ファインマンの講義をまとめて本書『量子力学と経路積分』を出版した．また，『ご冗談でしょう，ファインマンさん』に序文を寄せ，学生時代に接したファインマン教授の人柄を描いている．現在 カリフォルニア工科大学ジェット推進研究所所員．

訳者略歴

北原和夫〈きたはら・かずお〉 1946年新潟県長岡市に生まれる．1969年東京大学理学部物理学科卒業．1974年東京大学理学系大学院中退．1971-74年ブリュッセル大学物理化学科に留学．マサチューセッツ工科大学研究員，東京大学助手，静岡大学助教授，東京工業大学助教授を経て，現在 東京工業大学応用物理学科教授．著書 *Fluctuation Phenomena*（共著，North Holland）．訳書 クライツィグ『技術者のための高等数学１・常微分方程式』（培風館）ニコリス／プリゴジン『複雑性の探究』（共訳，みすず書房）．

R. P. ファインマン
A. R. ヒッブス

量子力学と経路積分

北原和夫訳

1995年 5 月10日　第 1 刷発行
1995年11月 8 日　第 2 刷発行

発行者 小熊勇次
発行所 株式会社 みすず書房 〒113 東京都文京区本郷 3 丁目17 - 15
電話 3814 - 0131(営業) 3815 - 9181(本社)
本文印刷所 理想社
扉・カバー印刷所 栗田印刷
製本所 鈴木製本所

Printed in Japan
ISBN 4 - 622 - 04100 - 6